KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

LÊ KIM LONG (Tổng Chủ biên)
ĐẶNG XUÂN THƯ (Chủ biên)
NGÔ TUẤN CƯỜNG – NGUYỄN VĂN HẢI – VŨ ANH TUẤN

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP

HOÁ HỌC 10

SACHHOC.COM

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

LÊ KIM LONG (Tổng Chủ biên)
ĐẶNG XUÂN THƯ (Chủ biên)
NGÔ TUẤN CƯỜNG – NGUYỄN VĂN HẢI – VŨ ANH TUẤN

Chuyên đề học tập

HOÁ HỌC

(Bản in thử)

10

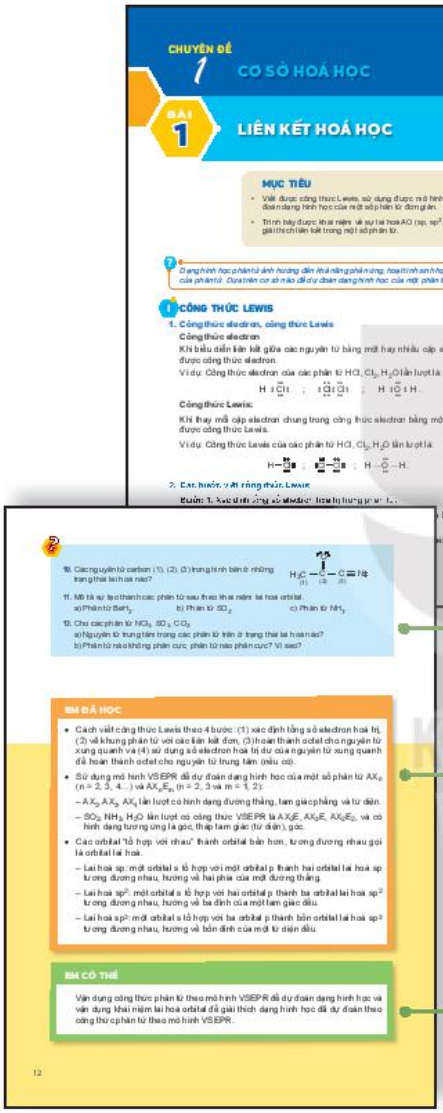
KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

SACHHOC.COM

NHÀ XUẤT BẢN GIÁO DỤC VIỆT NAM

HƯỚNG DẪN SỬ DỤNG SÁCH

Cuốn sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10* nằm trong bộ sách Kết nối tri thức với cuộc sống của Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam. Cuốn sách có ba chuyên đề, gồm 11 bài học và được thiết kế thành các hoạt động học tập theo chỉ dẫn dưới đây.



MỞ ĐẦU: Câu hỏi gợi mở, thu hút sự quan tâm tìm hiểu bài học mới.

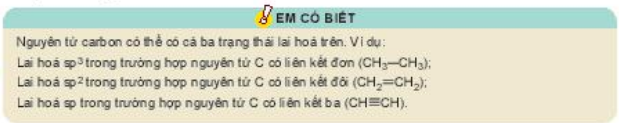
KHÁM PHÁ: Các em thực hiện các hoạt động khám phá, tìm hiểu kết hợp với các kiến thức đã có để rút ra các nội dung hoá học.

CÂU HỎI VÀ BÀI TẬP: Giúp các em hiểu rõ vấn đề của bài học, nâng cao năng lực tư duy, ứng dụng kiến thức đã học được.

EM ĐÃ HỌC: Kiến thức, kĩ năng cơ bản của bài học.

EM CÓ THỂ: Vận dụng kiến thức, kĩ năng đã học.

EM CÓ BIẾT: Mở rộng kiến thức, kết nối tri thức với cuộc sống.



Cuối sách có bảng Giải nghĩa một số thuật ngữ, giúp các em học sinh thuận tiện trong việc tra cứu.

Hãy bảo quản, giữ gìn sách giáo khoa để dành tặng các em học sinh lớp sau!

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

LỜI NÓI ĐẦU

Hoá học là ngành khoa học thuộc lĩnh vực khoa học tự nhiên, nghiên cứu về thành phần, cấu trúc, tính chất và sự biến đổi của các chất.

Hoá học kết hợp chặt chẽ giữa lí thuyết và thực nghiệm, là cầu nối giữa các ngành khoa học tự nhiên khác như vật lí, sinh học, y dược và địa chất học. Hoá học đóng vai trò quan trọng trong cuộc sống, sản xuất, góp phần vào sự phát triển bền vững kinh tế – xã hội, bảo vệ môi trường.

Cuốn sách *Chuyên đề học tập Hoá học 10*, cùng với cuốn *Hoá học 10*, bám sát Chương trình Giáo dục phổ thông môn Hoá học 2018, kế thừa và phát triển các mạch nội dung giáo dục đã hình thành từ các cấp học dưới, vừa giúp các em có hiểu biết sâu sắc về các kiến thức cơ sở chung của hoá học, vừa mang tính định hướng nghề nghiệp cho các em trong tương lai.

Cuốn sách được biên soạn dành cho các học sinh yêu thích và mong muốn tìm hiểu nhiều hơn về hoá học. Bên cạnh những kiến thức cơ bản trong cuốn sách *Hoá học 10*, cuốn *Chuyên đề học tập Hoá học 10* gồm ba chuyên đề với nội dung mở rộng, nâng cao, góp phần phát triển năng lực vận dụng tri thức hoá học cho các em:

- Chuyên đề 1. *Cơ sở hoá học*

  Mở rộng và nâng cao kiến thức về liên kết hoá học, hạt nhân và những nội dung liên quan đến các biến đổi hoá học như năng lượng hạt nhân, năng lượng hoá học, những điều kiện để quá trình hoá học xảy ra và điều khiển chúng.

- Chuyên đề 2. *Hoá học trong việc phòng chống cháy nổ*

  Trang bị những khái niệm liên quan đến sự cháy nổ và phòng chống cháy nổ từ góc độ hoá học.

- Chuyên đề 3. *Hoá học và công nghệ thông tin*

  Bao gồm các bài thực hành về công nghệ thông tin trong hoá học như biểu diễn cấu trúc phân tử, tính toán các tham số cấu trúc và thực hành các thí nghiệm ảo mô phỏng thực nghiệm hoá học.

Hi vọng cuốn sách sẽ mang đến cho các em nhiều kiến thức bổ ích và có thể giúp các em bước đầu định hướng một số nghề nghiệp liên quan đến hoá học phù hợp với bản thân.

Các tác giả

MỤC LỤC

		Trang
	Hướng dẫn sử dụng sách	2
	Lời nói đầu	3
Chuyên đề 1. CƠ SỞ HOÁ HỌC		5
Bài 1	Liên kết hoá học	5
Bài 2	Phản ứng hạt nhân	13
Bài 3	Năng lượng hoạt hoá của phản ứng hoá học	19
Bài 4	Entropy và biến thiên năng lượng tự do Gibbs	24
Chuyên đề 2. HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ		28
Bài 5	Sơ lược về phản ứng cháy, nổ	28
Bài 6	Điểm chớp cháy · Nhiệt độ ngọn lửa · Nhiệt độ tự bốc cháy	34
Bài 7	Hoá học về phản ứng cháy, nổ	38
Bài 8	Phòng chống cháy, nổ	43
Chuyên đề 3. THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN		51
Bài 9	Thực hành vẽ cấu trúc phân tử	51
Bài 10	Thực hành thí nghiệm hoá học ảo	60
Bài 11	Thực hành tính tham số cấu trúc và năng lượng	67
Giải thích một số thuật ngữ dùng trong sách		75

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

CHUYÊN ĐỀ 1

CƠ SỞ HOÁ HỌC

BÀI 1

LIÊN KẾT HOÁ HỌC

MỤC TIÊU

- Viết được công thức Lewis, sử dụng được mô hình VSEPR để dự đoán dạng hình học của một số phân tử đơn giản.
- Trình bày được khái niệm về sự lai hoá AO (sp, sp^2, sp^3), vận dụng giải thích liên kết trong một số phân tử.

Dạng hình học phân tử ảnh hưởng đến khả năng phản ứng, hoạt tính sinh học, tính phân cực,... của phân tử. Dựa trên cơ sở nào để dự đoán dạng hình học của một phân tử?

I CÔNG THỨC LEWIS

1. Công thức electron, công thức Lewis

Công thức electron

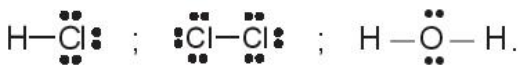
Khi biểu diễn liên kết giữa các nguyên tử bằng một hay nhiều cặp electron chung, ta được công thức electron.

Ví dụ: Công thức electron của các phân tử HCl, Cl_2, H_2O lần lượt là:

Công thức Lewis:

Khi thay mỗi cặp electron chung trong công thức electron bằng một gạch nối (–), ta được công thức Lewis.

Ví dụ: Công thức Lewis của các phân tử HCl, Cl_2, H_2O lần lượt là:



2. Các bước viết công thức Lewis

Bước 1. Xác định tổng số electron hoá trị trong phân tử.

Tổng số electron hoá trị trong phân tử bằng tổng số electron hoá trị của tất cả các nguyên tử trong phân tử.

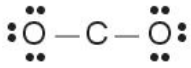
Ví dụ: Xét phân tử CO_2, tổng số electron hoá trị = $1 \cdot 4 + 2 \cdot 6 = 16$ electron.

Bước 2. Vẽ khung phân tử với các liên kết đơn. Trong đó, nguyên tử trung tâm thường là nguyên tử cần nhiều electron nhất để đạt octet, các nguyên tử còn lại xếp xung quanh nguyên tử trung tâm.

Trong phân tử CO_2, nguyên tử C cần 4 electron để đạt octet, nguyên tử O cần 2 electron hoá trị để đạt octet. Vì vậy, C là nguyên tử trung tâm, còn các nguyên tử O được xếp xung quanh:

Bước 3. Điền các electron hoá trị chưa tham gia liên kết vào các nguyên tử xung quanh để đạt octet.

Mỗi nguyên tử O cần 6 electron hoá trị để đạt octet:



Bước 4. Tính số electron hoá trị còn lại. Nếu còn các electron hoá trị thì sử dụng để hoàn thành octet của nguyên tử trung tâm. Nếu số electron hoá trị đã hết mà nguyên tử trung tâm chưa đạt octet thì chuyển các cặp electron hoá trị từ nguyên tử xung quanh để tạo liên kết đôi hoặc liên kết ba với nguyên tử trung tâm, sao cho phù hợp với hoá trị của nguyên tố.

– Trong phân tử CO_2, số electron hoá trị còn lại là: $16 - 2 \cdot 2 - 2 \cdot 6 = 0$.

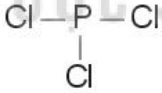
– Số electron hoá trị của nguyên tử C là 4, nên để đạt octet mỗi nguyên tử O dùng 1 cặp electron hoá trị để tạo liên kết đôi với nguyên tử C.

Công thức Lewis của phân tử CO_2:

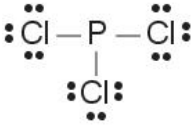
Ví dụ: Viết công thức Lewis của phân tử PCl_3.

(1) Tổng số số electron hoá trị trong phân tử: $1 \cdot 5 + 3 \cdot 7 = 26$

(2) Vẽ khung phân tử PCl_3.

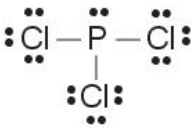


(3) Hoàn thiện octet cho các nguyên tử Cl.



(4) Tính số electron hoá trị còn lại: $26 - 3 \cdot 2 - 3 \cdot 6 = 2$.

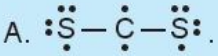
Chuyển 2 electron còn lại vào nguyên tử P để đạt octet, thu được công thức Lewis của phân tử PCl_3.



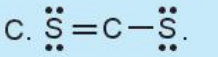
Lưu ý: Trong một số trường hợp nguyên tử trung tâm có thể có số lẻ eletron, hoặc nhiều hơn 8 electron.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

1. Công thức Lewis của CS_2 là

A.  .

B. .

C.  .

D. S = C = S.

2. Trình bày các bước để viết công thức Lewis của phân tử NH_3.

3. Viết các công thức Lewis cho mỗi phân tử sau:

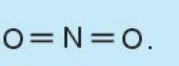
a) Cl_2; N_2.

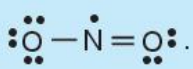
b) SO_2; SO_3.

c) H_2O; H_2S; HOCl.

4. Công thức Lewis biểu diễn cấu tạo của NO_2 là

A. O = N = O.

B.  .

C.  .

D. .

II CẤU TRÚC HÌNH HỌC CỦA MỘT SỐ PHÂN TỬ

1. Mô hình VSEPR (mô hình lực đẩy giữa các cặp electron hoá trị)

Liên kết cộng hoá trị được tạo thành bởi sự dùng chung các cặp electron. Các cặp electron này phân bố trong vùng không gian giữa hai hạt nhân nguyên tử tạo nên liên kết. Liên kết cộng hoá trị có tính định hướng không gian nên phân tử có hình dạng nhất định.

Công thức Lewis cho biết cấu tạo của phân tử nhưng không cho biết dạng hình học của phân tử. Mô hình VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion) được sử dụng để mô tả dạng hình học của các phân tử dựa trên lực đẩy giữa các cặp electron hoá trị.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

"Các cặp electron hoá trị được phân bố xung quanh nguyên tử trung tâm sao cho lực đẩy giữa chúng là nhỏ nhất".

Để sử dụng mô hình VSEPR, công thức phân tử của chất được viết dưới dạng AX_nE_m.

Trong đó:

A: nguyên tử trung tâm;

X: nguyên tử liên kết với nguyên tử A; n là số nguyên tử;

E: cặp electron hoá trị chưa liên kết của nguyên tử A; m là số cặp electron;

Nếu nguyên tử trung tâm lẻ một electron thì electron đó vẫn được tính tương đương một cặp electron.

Ví dụ: Công thức phân tử của methane viết theo mô hình VSEPR là CH_4.

Công thức phân tử của ammonia viết theo mô hình VSEPR là NH_3E.

Công thức phân tử của nước viết theo mô hình VSEPR là OH_2E_2.

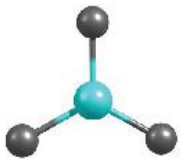
2. Hình dạng một số phân tử và ion

a) Trường hợp AX_n (với n = 2, 3, 4,…)

- Với n = 2 (AX_2): Xung quanh nguyên tử trung tâm A không có các cặp electron chưa liên kết, chỉ có hai cặp electron liên kết đẩy nhau, nên góc hoá trị lớn nhất là 180°, hai cặp electron liên kết được phân bố trên đường thẳng, phân tử có cấu trúc thẳng. Ví dụ: BeH_2, $BeCl_2$, CO_2,...

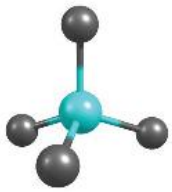
Mô hình phân tử AX_2

- Với n = 3 (AX_3): Xung quanh nguyên tử trung tâm A có ba cặp electron liên kết đẩy nhau, nên góc hoá trị lớn nhất là 120°. Ba cặp electron được phân bố trên mặt phẳng hướng về ba đỉnh của tam giác, phân tử có cấu trúc tam giác phẳng. Ví dụ: BF_3, SO_3,...



Mô hình phân tử AX_3

- Với n = 4 (AX_4): Xung quanh nguyên tử trung tâm A có bốn cặp electron liên kết đẩy nhau để góc hoá trị lớn nhất là 109,5°. Bốn cặp electron được phân bố hướng về bốn đỉnh của tứ diện, phân tử có cấu trúc tứ diện, tâm tứ diện là nguyên tử trung tâm A. Ví dụ: CH_4, NH_4^+, SO_4^{2-}, PO_4^{3-},...

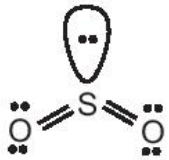


Mô hình phân tử AX_4

b) Dự đoán dạng hình học của một số trường hợp AX_nE_m

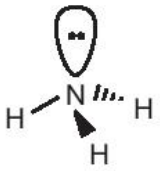
Các electron độc thân, cặp electron chưa liên kết chiếm không gian lớn hơn so với cặp electron liên kết, làm giảm góc liên kết của phân tử. Các nguyên tử xung quanh có độ âm điện lớn hơn hút cặp electron liên kết mạnh hơn, làm giảm góc liên kết của phân tử.

- Phân tử SO_2: Xung quanh nguyên tử trung tâm S có một cặp electron chưa liên kết (hình bên), công thức VSEPR của SO_2 là AX_2E. Do cặp electron chưa liên kết chiếm khoảng không gian lớn hơn so với các cặp electron liên kết, tương tác đẩy giữa cặp electron chưa liên kết lớn hơn tương tác đẩy giữa các cặp electron liên kết, nên góc liên kết $\widehat{OSO}$ thực tế bằng 119°, nhỏ hơn góc hoá trị theo lí thuyết (120°). Phân tử có dạng góc.



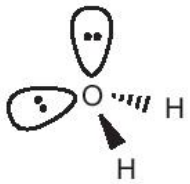
Sơ đồ phân tử SO_2

- Phân tử NH_3: Xung quanh nguyên tử trung tâm N có một cặp electron chưa liên kết (hình bên), công thức VSEPR của NH_3 là AX_3E. Do cặp electron chưa liên kết chiếm khoảng không gian lớn hơn so với các cặp electron liên kết, tương tác đẩy giữa cặp electron chưa liên kết lớn hơn tương tác đẩy giữa các cặp electron liên kết, nên góc liên kết $\widehat{HNH}$ thực tế bằng 107°, nhỏ hơn góc hoá trị theo lí thuyết (109,5°). Phân tử có dạng tháp tam giác.



Sơ đồ phân tử NH_3

- Phân tử H_2O: Xung quanh nguyên tử trung tâm O có hai cặp electron chưa liên kết, công thức VSEPR của H_2O là AX_2E_2. Do cặp electron chưa liên kết chiếm khoảng không gian lớn hơn so với các cặp electron liên kết, tương tác đẩy giữa cặp electron chưa liên kết lớn hơn tương tác đẩy giữa các cặp electron liên kết, nên góc liên kết $\widehat{HOH}$ thực tế bằng 104,5°, nhỏ hơn góc hoá trị theo lí thuyết (109,5°). Phân tử có dạng góc.



Sơ đồ phân tử H_2O

5. Công thức của PCl_3 theo mô hình VSEPR là

A. AX_3. B. AXE_2. C. AX_3E. D. AX_2E.

6. Viết công thức của một số phân tử sau theo mô hình VSEPR: CCl_4, H_2S, CO_2, SO_3 và PH_3. Nêu số cặp electron hoá trị liên kết và chưa liên kết trong mỗi phân tử.

7. Viết công thức theo mô hình VSEPR và cho biết dạng hình học của phân tử OF_2. Phân tử này có phân cực không?

8. Dạng hình học của ion NH_4^+ là

A. tứ diện đều. B. tháp tam giác. C. tam giác phẳng. D. đường thẳng.

9. Dự đoán dạng hình học của một số phân tử sau: CO_2, CS_2, BF_3, SCl_2.

III SỰ LAI HOÁ ORBITAL NGUYÊN TỬ

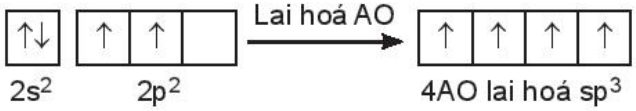
1. Khái niệm lai hoá orbital

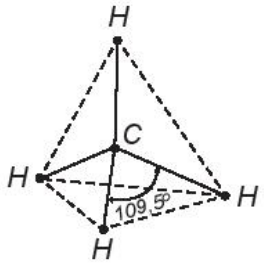
Khi sử dụng sự xen phủ các orbital nguyên tử tạo thành liên kết hoá học, không giải thích được góc liên kết ở một số trường hợp. Ví dụ: Nếu dựa vào sự xen phủ các orbital 1s của các nguyên tử H với các orbital 2s và 2p của nguyên tử C trong phân tử CH_4 thì các góc liên kết $\widehat{HCH}$ không hoàn toàn bằng nhau. Nhưng trong thực tế, góc liên kết $\widehat{HCH}$ trong phân tử CH_4 đều bằng nhau (đều bằng 109,5°).

Để giải thích điều này, có thể sử dụng khái niệm "lai hoá orbital". Các orbital của cùng một nguyên tử có năng lượng gần nhau có thể "tổ hợp" với nhau tạo ra orbital mới có hình dạng giống nhau và có năng lượng bằng nhau nhưng định hướng khác nhau trong không gian, gọi là orbital lai hoá. Số orbital lai hoá được hình thành bằng tổng số orbital tham gia lai hoá.

Ví dụ: Áp dụng lai hoá orbital để giải thích góc liên kết trong phân tử CH_4:

Cấu hình electron hoá trị của nguyên tử C: $2s^22p^2$. Một orbital 2s tổ hợp với ba orbital 2p tạo ra bốn orbital lai hoá hoàn toàn giống nhau, hướng về bốn đỉnh của tứ diện đều. Bốn orbital lai hoá này xen phủ với các orbital 1s của bốn nguyên tử H, tạo ra bốn liên kết σ (C — H), nên góc liên kết $\widehat{HCH}$ trong tứ diện đều (có nguyên tử C ở tâm) bằng 109,5°.

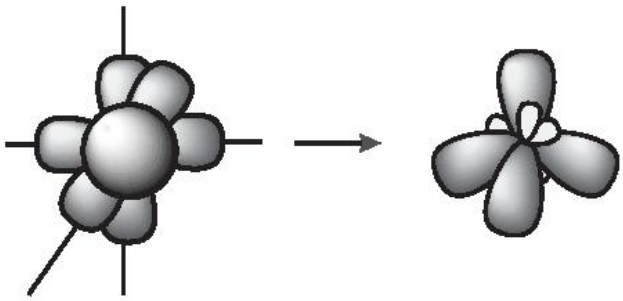




2. Một số trạng thái lai hoá cơ bản

a) Lai hoá sp^3

Một AO s tổ hợp với ba AO p trong một nguyên tử tạo ra bốn AO lai hoá sp^3, hướng về bốn đỉnh của một tứ diện đều mà tâm của hình tứ diện là hạt nhân nguyên tử đang xét. Góc tạo bởi hai trục của hai AO kề nhau là 109,5°. Lai hoá sp^3 còn được gọi là lai hoá tứ diện.

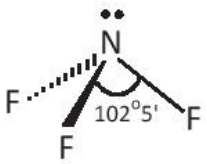


Ví dụ: Phân tử nitrogen trifluoride NF_3.

Cấu hình electron hoá trị của N: $2s^22p^3$.

Trong nguyên tử N, một AO 2s lai hoá với ba AO 2p, tạo ra bốn AO lai hoá sp^3.

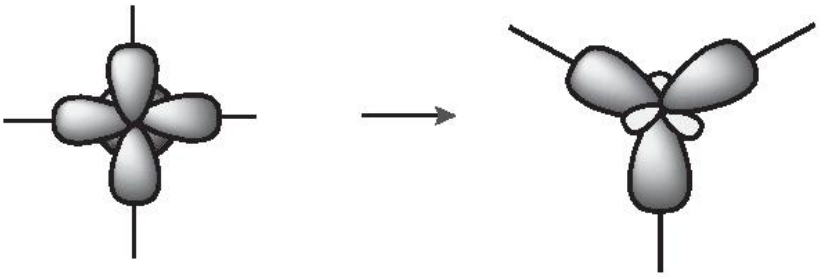
Ba AO lai hoá sp^3 (chứa electron độc thân) của nguyên tử N xen phủ với AO 2p của ba nguyên tử fluorine, tạo thành ba liên kết σ, hướng về ba đỉnh của hình tứ diện. Nguyên tử nitrogen còn một AO lai hoá sp^3 chứa một cặp electron chưa liên kết nằm hướng về đỉnh còn lại của hình tứ diện.



KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

b) Lai hoá sp^2

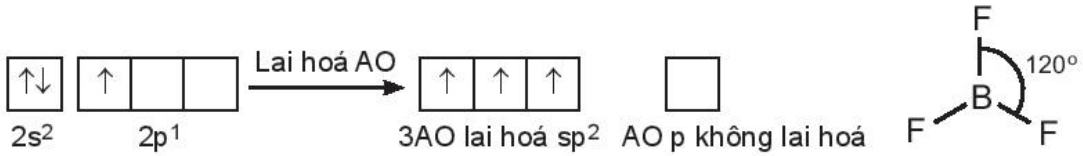
Một AO s tổ hợp với hai AO p trong một nguyên tử, tạo ra ba AO lai hoá sp^2 hướng về ba đỉnh của một tam giác đều. Ba AO này cùng nằm trong một mặt phẳng, góc tạo bởi hai trục của hai AO kề nhau là 120°. Lai hoá sp^2 còn được gọi là lai hoá tam giác phẳng.



Ví dụ: Phân tử boron trifluoride BF_3.

Cấu hình electron hoá trị của B: $2s^2 2p^1$.

Trong nguyên tử B, một AO 2s lai hoá với hai AO 2p, tạo ra ba AO lai hoá sp^2.



Ba AO lai hoá sp^2 của nguyên tử B xen phủ với ba AO 2p (chứa electron độc thân) của ba nguyên tử fluorine, tạo thành ba liên kết σ hướng về ba đỉnh của tam giác đều, giải thích cho dự đoán dạng hình học của phân tử BF_3 (dạng AX_3) theo mô hình VSEPR.

Trong phân tử BF_3 còn có một liên kết π.

c) Lai hoá sp

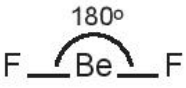
Một AO s tổ hợp với một AO p trong một nguyên tử tạo ra hai AO lai hoá sp, góc tạo bởi hai AO lai hoá là 180°. Lai hoá sp còn được gọi là lai hoá thẳng.

Ví dụ: Phân tử beryllium fluoride BeF_2.

Cấu hình electron hoá trị của Be: $2s^2$.

Trong nguyên tử Be, một AO 2s tổ hợp với một AO 2p, tạo ra hai AO lai hoá sp.

Hai AO lai hoá sp của nguyên tử Be xen phủ với hai AO p của hai nguyên tử F tạo thành hai liên kết σ hướng về hai phía của một đường thẳng, góc liên kết là 180°, giải thích cho dự đoán dạng hình học của phân tử BeF_2 (dạng AX_2) theo mô hình VSEPR.



EM CÓ BIẾT

Nguyên tử carbon có thể có cả ba trạng thái lai hoá trên. Ví dụ:

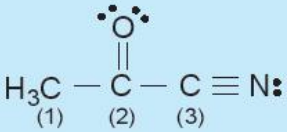
Lai hoá sp^3 trong trường hợp nguyên tử C có liên kết đơn (CH_3—CH_3);

Lai hoá sp^2 trong trường hợp nguyên tử C có liên kết đôi (CH_2=CH_2);

Lai hoá sp trong trường hợp nguyên tử C có liên kết ba (CH≡CH).

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

10. Các nguyên tử carbon (1), (2), (3) trong hình bên ở những trạng thái lai hoá nào?



11. Mô tả sự tạo thành các phân tử sau theo khái niệm lai hoá orbital.

a) Phân tử BeH_2. b) Phân tử SO_2. c) Phân tử NH_3.

12. Cho các phân tử NCl_3, SO_3, CO_2.

a) Nguyên tử trung tâm trong các phân tử trên ở trạng thái lai hoá nào?

b) Phân tử nào không phân cực, phân tử nào phân cực? Vì sao?

EM ĐÃ HỌC

- Cách viết công thức Lewis theo 4 bước: (1) xác định tổng số electron hoá trị, (2) vẽ khung phân tử với các liên kết đơn, (3) hoàn thành octet cho nguyên tử xung quanh và (4) sử dụng số electron hoá trị dư (nếu có) của nguyên tử xung quanh để hoàn thành octet cho nguyên tử trung tâm.
- Sử dụng mô hình VSEPR để dự đoán dạng hình học của một số phân tử AX_n (n = 2, 3, 4…) và AX_nE_m (n = 2, 3 và m = 1, 2):
  - AX_2, AX_3, AX_4 lần lượt có hình dạng đường thẳng, tam giác phẳng và tứ diện.
  - SO_2, NH_3, H_2O lần lượt có công thức VSEPR là AX_2E, AX_3E, AX_2E_2, và có hình dạng tương ứng là góc, tháp tam giác, góc.
- Các orbital "tổ hợp với nhau" thành các orbital mới – orbital lai hoá.
  - Lai hoá sp: một orbital s tổ hợp với một orbital p thành hai orbital lai hoá sp tương đương nhau, hướng về hai phía của một đường thẳng.
  - Lai hoá sp^2: một orbital s tổ hợp với hai orbital p thành ba orbital lai hoá sp^2 tương đương nhau, hướng về ba đỉnh của một tam giác đều.
  - Lai hoá sp^3: một orbital s tổ hợp với ba orbital p thành bốn orbital lai hoá sp^3 tương đương nhau, hướng về bốn đỉnh của một tứ diện đều.

EM CÓ THỂ

Vận dụng công thức phân tử theo mô hình VSEPR để dự đoán dạng hình học và vận dụng khái niệm lai hoá orbital để giải thích dạng hình học đã dự đoán theo công thức phân tử theo mô hình VSEPR.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

BÀI 2

PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

MỤC TIÊU

- Nêu được sơ lược về sự phóng xạ tự nhiên; lấy được ví dụ về sự phóng xạ tự nhiên.
- Vận dụng được các định luật bảo toàn số khối và điện tích cho phản ứng hạt nhân.
- Nêu được sơ lược về sự phóng xạ nhân tạo, phản ứng hạt nhân.
- Nêu được ứng dụng của phản ứng hạt nhân phục vụ nghiên cứu khoa học, đời sống và sản xuất.
- Nêu được ứng dụng điển hình của phản ứng hạt nhân: xác định niên đại cổ vật, các ứng dụng trong lĩnh vực y tế, năng lượng.

Loại phản ứng nào liên quan đến phóng xạ được sử dụng để chẩn đoán và điều trị bệnh trong y học, sản xuất điện năng và xác định niên đại trong khảo cổ,...?

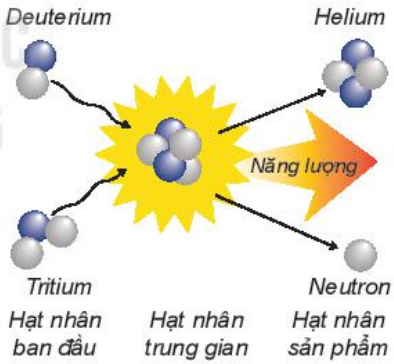
1 PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

1. Khái niệm

Phản ứng hạt nhân là sự biến đổi hạt nhân nguyên tử của một nguyên tố hoá học này thành hạt nhân nguyên tử của một nguyên tố hoá học khác.

Trong các phản ứng hoá học, chỉ có lớp vỏ electron trong nguyên tử bị thay đổi (thêm vào, hoặc bớt đi, hoặc dùng chung electron với nguyên tử khác,...), còn hạt nhân nguyên tử không thay đổi. Trong các phản ứng hạt nhân, thành phần của hạt nhân nguyên tử bị thay đổi, nguyên tố này có thể biến thành nguyên tố khác.

Sự khác biệt quan trọng giữa phản ứng hoá học và phản ứng hạt nhân là sự biến đổi năng lượng trong các phản ứng hạt nhân lớn hơn nhiều so với các phản ứng hoá học.



Hình 2.1. *Mô hình mô tả một phản ứng hạt nhân*

2. Định luật bảo toàn số khối và bảo toàn điện tích

Trong phản ứng hạt nhân, cả số khối và điện tích đều được bảo toàn.

- Sau khi tách ra một hạt α (hạt nhân nguyên tử helium, kí hiệu là ${}_2^4\mathrm{He}$), hạt nhân nguyên tử ban đầu bị giảm đi 2 đơn vị điện tích hạt nhân và 4 đơn vị của số khối. Ví dụ:

$^{226}_{88}Ra \longrightarrow {}^{222}_{86}Rn + {}^{4}_{2}He$ (Phương trình biểu diễn này được gọi là phương trình hạt nhân)

- Sau khi tách ra một hạt β ($^{0}_{-1}e$), hạt nhân nguyên tử ban đầu tăng thêm 1 đơn vị điện tích hạt nhân, số khối không thay đổi. Ví dụ:

$$^{239}_{93}Np \longrightarrow {}^{239}_{94}Pu + {}^{0}_{-1}e$$

II PHÓNG XẠ TỰ NHIÊN

1. Tính phóng xạ tự nhiên

Tính phóng xạ tự nhiên là khả năng tự phân rã của hạt nhân nguyên tử, tạo thành hạt nhân nguyên tử của nguyên tố khác, đồng thời phát ra bức xạ không nhìn thấy.

2. Thành phần của tia phóng xạ

- Phóng xạ kiểu α (alpha) là sự phân rã hạt nhân phóng ra hạt α.

  Ví dụ: Hạt nhân $^{238}_{92}U$ phân rã, tạo ra hạt nhân $^{234}_{90}Th$ và phóng ra hạt α.

$$^{238}_{92}U \longrightarrow {}^{234}_{90}Th + {}^{4}_{2}He$$

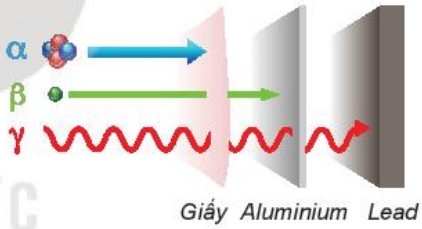
- Phóng xạ kiểu β (beta) là sự phân rã hạt nhân phóng ra hạt β.

  Ví dụ: Hạt nhân $^{238}_{92}U$ phân rã, tạo ra hạt nhân $^{239}_{93}Np$ và phóng ra hạt β.

$$^{239}_{92}U \longrightarrow {}^{239}_{93}Np + {}^{0}_{-1}e$$

- Phóng xạ kiểu γ (gamma): Sự phân rã hạt nhân theo kiểu phóng xạ α, β thường kèm theo các hạt γ. Hạt γ không mang điện, chính là photon có bản chất của bức xạ điện từ, cùng bản chất với ánh sáng.

  Các tia α, β, γ có khả năng đâm xuyên và khả năng gây ion hoá khác nhau. Tia γ có khả năng đâm xuyên lớn nhất, tia α có khả năng đâm xuyên kém nhất, nhưng khả năng ion hoá của tia α mạnh nhất, còn khả năng gây ion hoá của tia γ kém nhất.



Hình 2.2. *Mô tả khả năng đâm xuyên của các tia phóng xạ qua giấy, aluminium và lead*

3. Độ bền của đồng vị phóng xạ và chu kì bán rã

Tốc độ phân rã của một đồng vị phóng xạ thường được biểu diễn bằng chu kì bán rã.

Chu kì bán rã của một đồng vị phóng xạ là thời gian để phân rã một nửa số nguyên tử ban đầu (hay một nửa lượng chất ban đầu).

Ví dụ: Chu kì bán rã của đồng vị phóng xạ $^{90}_{38}Sr$ là 28 năm, nghĩa là nếu ban đầu có 1,0 g $^{90}_{38}Sr$ thì sau 28 năm lượng $^{90}_{38}Sr$ chỉ còn lại 0,5 g; sau 28 năm tiếp theo chỉ còn 0,25 g.

Chu kì bán rã càng ngắn, đồng vị bị phân rã càng nhanh, đồng vị càng kém bền. Chu kì bán rã càng dài, đồng vị bị phân rã càng chậm, đồng vị càng bền. Như vậy, chu kì bán rã của một đồng vị phóng xạ là thước đo độ bền tương đối của đồng vị đó.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

1. Hoàn thành các phương trình hạt nhân sau đây:

a) $^{32}_{15}P \longrightarrow ? + {}^{0}_{-1}e$ b) $^{43}_{19}K \longrightarrow {}^{43}_{20}Ca + ?$

2. Viết phương trình biểu diễn sự phóng xạ của các đồng vị:

a) $^{226}_{88}Ra \longrightarrow ? + \alpha$ b) $^{237}_{93}Np \longrightarrow ? + \alpha$

c) $^{32}_{16}S \longrightarrow ? + \beta$ d) $^{3}_{1}H \longrightarrow ? + \beta$

3. Hạt nhân $^{223}_{90}Th$ bức xạ liên tiếp hai electron, tạo ra một đồng vị uranium. Viết phương trình biểu diễn quá trình đó.

III PHÓNG XẠ NHÂN TẠO

1. Tính phóng xạ nhân tạo

Hiện tượng phóng xạ nhân tạo được Irène Joliot-Curie (Iren Quyri – con gái của Marie Curie) cùng chồng tìm ra năm 1934, khi bắn phá hạt nhân nguyên tử boron, aluminium, magnesium bằng tia α phát ra từ hạt nhân nguyên tử radium hoặc polonium.

Ví dụ: $^{27}_{13}Al + {}^{4}_{2}He \longrightarrow {}^{30}_{15}P + {}^{1}_{0}n$

Đồng vị $^{30}_{15}P$ điều chế nhân tạo bằng cách trên không bền, tự phân rã phóng xạ theo phương trình:

$$^{30}_{15}P \longrightarrow {}^{30}_{14}Si + {}^{0}_{+1}e$$

Ở trường hợp này thoát ra hạt positron ($^{0}_{+1}e$), có khối lượng bằng khối lượng electron và có điện tích bằng +1.

Hiện nay, bằng cách này các nhà khoa học đã điều chế nhân tạo được rất nhiều đồng vị phóng xạ của hầu hết các nguyên tố, bổ sung thêm những ô còn trống trong bảng tuần hoàn.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

2. Sự phân chia hạt nhân và sự tổng hợp hạt nhân

- Sự phân chia hạt nhân (*phân hạch hạt nhân*) là phản ứng phân chia hạt nhân nặng thành hai hay nhiều mảnh có khối lượng nhẹ hơn.

Ví dụ: Khi bắn phá bằng neutron chậm thì hạt nhân $^{235}_{92}U$ bị phân chia thành hai mảnh:

$$^{235}_{92}U + {}^{1}_{0}n \longrightarrow \left[{}^{236}_{92}U\right] \longrightarrow {}^{141}_{56}Ba + {}^{92}_{36}Kr + 3{}^{1}_{0}n + \text{năng lượng}$$

Khi một mol uranium phản ứng giải phóng một năng lượng khổng lồ là $2 \cdot 10^{10}$ kJ, có sức công phá tương đương với 20 000 tấn thuốc nổ TNT (trinitrotoluene), gấp rất nhiều lần so với năng lượng toả ra từ một phản ứng hoá học.

Trung bình khi dùng 1 hạt neutron để bắn phá hạt nhân $^{235}_{92}U$ thì có 3 neutron mới phát ra. Các neutron này có thể bắn phá tiếp để phân chia hạt nhân khác. Như thế, trong những điều kiện xác định, phản ứng phân chia $^{235}_{92}U$ có thể tự duy trì và gọi là phản ứng dây chuyền. Nếu lượng $^{235}_{92}U$ đủ lớn và xảy ra phản ứng dây chuyền thì sẽ có một vụ nổ hạt nhân, làm nhiệt độ tăng lên hàng triệu °C.

Trong các đồng vị uranium chỉ $^{235}_{92}U$ là có khả năng phản ứng phân chia hạt nhân (nổ hạt nhân), nhưng $^{235}_{92}U$ chỉ chiếm khoảng 0,7% lượng uranium tự nhiên, còn lại là $^{238}_{92}U$. Đồng vị $^{238}_{92}U$ không có khả năng phân chia hạt nhân, nhưng có khả năng hấp thụ neutron tạo ra $^{239}_{92}U$. Sau thời gian ngắn, $^{239}_{92}U$ tự phân rã thành đồng vị plutonium $^{239}_{94}Pu$. Đồng vị phóng xạ $^{239}_{94}Pu$ cũng có khả năng phân chia hạt nhân như $^{235}_{92}U$:

$$^{239}_{94}Pu + {}^{1}_{0}n \longrightarrow \left[{}^{240}_{94}Pu\right] \longrightarrow {}^{91}_{39}Y + {}^{146}_{55}Cs + 3{}^{1}_{0}n + \text{năng lượng}$$

- Sự tổng hợp hạt nhân là phản ứng giữa các hạt nhân nhẹ kết hợp với nhau, tạo thành hạt nhân nặng hơn. Các hạt nhân tham gia phản ứng phải được nung nóng nên phản ứng này còn gọi là *phản ứng nhiệt hạch*.

  Ví dụ: phản ứng tạo nguồn năng lượng của Mặt Trời:

$$4\left({}^{1}_{1}H\right) \longrightarrow {}^{4}_{2}He + 2\left({}^{0}_{+1}e\right) + \text{năng lượng}$$

Phản ứng tạo thành 1 mol helium giải phóng ra năng lượng là $2,5 \cdot 10^9$ kJ. Nhiệt độ cần thiết cho phản ứng xảy ra là 1 triệu đến 10 triệu °C (nhiệt độ của Mặt Trời).

Trên Trái Đất, các nhà khoa học cố gắng thực hiện phản ứng:

$$^{2}_{1}D + {}^{2}_{1}D \longrightarrow {}^{3}_{2}He + {}^{1}_{0}n + 2,9 \cdot 10^8 \text{ kJ/mol}$$

Đây là phản ứng làm cơ sở cho bom khinh khí (bom hydrogen). Một vụ nổ bom hydrogen có nhiệt độ đến hàng chục triệu °C.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

4. Ở tầng cao khí quyển, do tác dụng của neutron có trong tia vũ trụ, $^{14}_{7}N$ phân rã thành $^{14}_{6}C$ và proton. Viết phương trình của phản ứng hạt nhân đó.

5. Hoàn thành các phản ứng hạt nhân sau:

a) $^{26}_{12}Mg + \ ? \longrightarrow {}^{23}_{10}Ne + {}^{4}_{2}He$

b) $^{19}_{9}F + {}^{1}_{1}H \longrightarrow \ ? \ + {}^{4}_{2}He$

c) $^{242}_{94}Pu + {}^{22}_{10}Ne \longrightarrow 4\left({}^{1}_{0}n\right) + \ ?$

d) $^{2}_{1}H + \ ? \longrightarrow 2\left({}^{4}_{2}He\right) + {}^{1}_{0}n$

6. Xét phản ứng phân hạch đơn giản sau: $^{235}_{92}U + {}^{1}_{0}n \longrightarrow {}^{137}_{52}Te + X + 2\left({}^{1}_{0}n\right)$.

X là hạt nhân nào sau đây?

A. $^{96}_{39}Y$. B. $^{97}_{40}Zr$. C. $^{97}_{43}Tc$. D. $^{98}_{38}Sr$.

IV ỨNG DỤNG CỦA ĐỒNG VỊ PHÓNG XẠ VÀ PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

1. Trong y học

Xạ trị là phương pháp sử dụng các tia bức xạ ion hoá như: tia X, tia γ có năng lượng cao, đó là các sóng điện từ hoặc các hạt như: electron, neutron, proton,... để điều trị bệnh ung thư.

Cấu trúc của DNA bên trong gene của các động, thực vật có thể thay đổi khi bị chiếu xạ.

Đồng vị phóng xạ ${}^{60}_{27}Co$ là nguồn phát xạ γ thông dụng nhất. Các tia γ phát ra từ Co có khả năng xuyên sâu nên bức xạ γ được dùng để chụp ảnh, điều trị các khối u ở sâu trong cơ thể,...

$${}^{59}_{27}Co + {}^{1}_{0}n \longrightarrow {}^{60}_{27}Co, \text{ sau đó } {}^{60}_{27}Co \longrightarrow {}^{60}_{28}Ni + {}^{0}_{-1}e \ ; E \approx 1{,}25 \text{ MeV}$$

Các bệnh ung thư bên ngoài như ung thư da có thể điều trị bằng các tia phóng xạ phát ra từ đồng vị ${}^{30}_{15}P$ hay ${}^{90}_{38}Sr$ bằng cách áp các túi nhựa đựng đồng vị phóng xạ vào vùng bị tổn thương.

Dùng đồng vị phóng xạ ${}^{131}_{53}I$ để chẩn đoán và chữa bệnh bướu cổ.

2. Trong nông nghiệp

Sự chiếu xạ có thể làm thay đổi gene của thực vật tạo nên những đột biến và có thể tạo ra các giống mới. Sự chiếu xạ lương thực, thực phẩm bằng tia γ phát ra từ đồng vị ${}^{60}_{27}Co$ có tác dụng diệt khuẩn, bảo quản lương thực, thực phẩm lâu dài hơn.

3. Xác định niên đại cổ vật bằng hàm lượng đồng vị phóng xạ

a) Xác định niên đại (tuổi) của các di vật khảo cổ bằng đồng vị ${}^{14}_{6}C$

Cơ sở để xác định niên đại bằng ${}^{14}_{6}C$ là quá trình tạo thành ${}^{14}_{6}C$ xảy ra đồng thời với quá trình phân rã nó:

$${}^{14}_{7}N + {}^{1}_{0}n \longrightarrow {}^{14}_{6}C + {}^{1}_{1}H \quad \text{và} \quad {}^{14}_{6}C \longrightarrow {}^{14}_{7}N + {}^{0}_{-1}e$$

Do sự tạo thành và phân rã xảy ra đồng thời nên khí quyển luôn chứa một lượng ${}^{14}_{6}C$ với nồng độ không đổi dưới dạng ${}^{14}CO_2$. Lượng ${}^{14}CO_2$ này xâm nhập vào cây cối thông qua sự quang hợp và từ cây cối chuyển sang động vật. Khi đó, mỗi loại sinh vật sống đều có một hàm lượng ${}^{14}_{6}C$ không đổi.

Khi động, thực vật chết đi, sự hấp thụ ${}^{14}_{6}C$ ngừng lại, nhưng sự phân rã ${}^{14}_{6}C$ vẫn tiếp tục, làm cho lượng ${}^{14}_{6}C$ giảm theo thời gian. So sánh hàm lượng ${}^{14}_{6}C$ chứa trong một mẫu vật khảo cổ với hàm lượng ${}^{14}_{6}C$ trong mẫu vật tương tự ở thời hiện tại là có thể xác định được tuổi của mẫu vật nghiên cứu.

b) Xác định niên đại (tuổi) của đá trong địa chất bằng đồng vị ${}^{238}_{92}U$

Đồng vị ${}^{238}_{92}U$ là đồng vị phóng xạ tự nhiên, sự phân rã đồng vị này cuối cùng tạo ra đồng vị bền là ${}^{206}_{82}Pb$. Mẫu đá sơ khai chứa ${}^{238}_{92}U$, còn mẫu đá nghiên cứu chứa hỗn hợp ${}^{238}_{92}U$ và ${}^{206}_{82}Pb$. Dựa vào tỉ lệ của ${}^{238}_{92}U/{}^{206}_{82}Pb$ của mẫu đá nghiên cứu (xác định bằng phổ khối) có thể tính được thời gian tồn tại của mẫu đá nghiên cứu.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

4. Sử dụng năng lượng nguyên tử phục vụ cho lợi ích nhân loại

Dùng các đồng vị $^{235}_{92}U$ và $^{239}_{94}Pu$ làm nhiên liệu trong các lò phản ứng hạt nhân để sản xuất ra điện (nhà máy điện nguyên tử) và chạy các tàu phá băng,...

7. Hãy nêu những ứng dụng quan trọng của các đồng vị sau: $^{60}_{27}Co$, $^{30}_{15}P$, $^{131}_{53}I$, $^{239}_{94}Pu$.

8. Đồng vị phóng xạ plutonium ($^{239}_{94}Pu$) có khả năng phân hạch hạt nhân để giải phóng ra một năng lượng cực lớn và được sử dụng trong nhà máy điện nguyên tử để sản xuất ra điện. Đồng vị $^{239}_{94}Pu$ có thể phân rã theo ba cách: (1) Nhận 1 electron; (2) bức xạ 1 positron; (3) bức xạ 1 hạt α.
Hãy viết phương trình cho mỗi trường hợp đó.

EM ĐÃ HỌC

- Phản ứng hạt nhân là sự biến đổi hạt nhân nguyên tử của một nguyên tố hoá học thành hạt nhân nguyên tử của nguyên tố hoá học khác.
  - Sự khác biệt giữa phản ứng hạt nhân với phản ứng hoá học là trong phản ứng hạt nhân, hạt nhân nguyên tử đã bị thay đổi (dẫn đến thay đổi nguyên tố) và sự biến đổi năng lượng vô cùng lớn.
  - Phương trình biểu diễn phản ứng hạt nhân gọi là phương trình hạt nhân.
- Trong phản ứng hạt nhân, tổng điện tích hạt nhân và tổng số khối của các nguyên tử trước phản ứng bằng tổng điện tích hạt nhân và tổng số khối của các nguyên tử thu được sau phản ứng.
- Sự phóng xạ tự nhiên là khả năng phân rã hạt nhân nguyên tử này thành hạt nhân của nguyên tử khác kèm theo sự phát ra bức xạ không nhìn thấy (hạt α, hạt β và tia γ). Chu kì bán huỷ cho biết độ bền của đồng vị phóng xạ.
- Sự phóng xạ nhân tạo là phản ứng giữa hạt nhân nguyên tử với các hạt (α, β, neutron,...) tạo ra các đồng vị phóng xạ mới.
- Đồng vị phóng xạ và phản ứng hạt nhân được ứng dụng trong nhiều lĩnh vực như y học, nông nghiệp, năng lượng, xác định niên đại cổ vật,...

EM CÓ THỂ

Vận dụng kiến thức về phóng xạ tự nhiên và phản ứng hạt nhân để hiểu ứng dụng của các hiện tượng đó trong một số lĩnh vực: y tế (chẩn đoán và điều trị ung thư, xạ trị,...), nông nghiệp (tạo giống mới, bảo quản hoa quả,...), năng lượng (điện nguyên tử,...) và khảo cổ (xác định niên đại cổ vật,...).

BÀI 3

NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ CỦA PHẢN ỨNG HOÁ HỌC

MỤC TIÊU

- Trình bày được khái niệm năng lượng hoạt hoá (theo khía cạnh ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng).
- Nêu được ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng thông qua phương trình Arrhenius: $k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$.
- Giải thích được vai trò của chất xúc tác.

Hydrogen và oxygen không phản ứng với nhau ở nhiệt độ thường, nhưng khi đưa một ít bột platinium (Pt) vào hỗn hợp hai khí đó, phản ứng xảy ra ngay tức khắc, tạo thành nước. Yếu tố nào quyết định sự thay đổi đó?

I NĂNG LƯỢNG HOẠT HOÁ

1. Khái niệm năng lượng hoạt hoá

Năng lượng hoạt hoá (E_a) là năng lượng tối thiểu mà các chất phản ứng cần có để phản ứng hoá học có thể xảy ra.

Để phản ứng hoá học xảy ra thì các phân tử chất phản ứng phải va chạm vào nhau, nhưng không phải mọi va chạm đều gây ra phản ứng, mà chỉ những va chạm có hiệu quả mới gây ra phản ứng. Các va chạm có hiệu quả thường xảy ra giữa các phân tử có năng lượng đủ lớn (phân tử hoạt động), đó là năng lượng dư so với năng lượng trung bình của tất cả các phân tử.

Năng lượng hoạt hoá càng lớn, số phân tử hoạt động càng ít, số va chạm có hiệu quả càng nhỏ, dẫn đến tốc độ phản ứng càng nhỏ và ngược lại năng lượng hoạt hoá càng nhỏ, tốc độ phản ứng càng lớn.

2. Ảnh hưởng của năng lượng hoạt hoá và nhiệt độ tới tốc độ phản ứng

Mối liên hệ giữa nhiệt độ, năng lượng hoạt hoá với hằng số tốc độ phản ứng được biểu thị trong phương trình kinh nghiệm Arrhenius (A-re-ni-ut):

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Trong đó: A là hằng số đặc trưng cho mỗi phản ứng

e = 2,7183;

R là hằng số khí lí tưởng (R = 8,314 J/(mol·K));

T là nhiệt độ (theo thang Kelvin);

E_a là năng lượng hoạt hoá, đơn vị J/mol.

Khi E_a càng lớn thì k càng nhỏ, tốc độ phản ứng càng nhỏ.

Tại nhiệt độ T_1 và T_2 tương ứng với hằng số tốc độ k_{T_1} và k_{T_2}, phương trình Arrhenius được viết như sau:

$$\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{E_a}{R}\cdot\left(\frac{1}{T_1}-\frac{1}{T_2}\right)$$

Ví dụ: Với phản ứng có năng lượng hoạt hoá E_a = 70 kJ/mol, khi tăng nhiệt độ từ 300 K đến 400 K, tốc độ phản ứng sẽ thay đổi như thế nào?

Lời giải:

$$\ln\frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = \frac{70\cdot10^3}{8{,}314}\cdot\left(\frac{1}{300}-\frac{1}{400}\right) \Rightarrow \frac{k_{T_2}}{k_{T_1}} = 1115$$

Như vậy khi nhiệt độ tăng từ 300 K đến 400 K thì tốc độ phản ứng tăng 1115 lần.

1. Cho phản ứng: $2NOCl(g) \longrightarrow 2NO(g) + Cl_2(g)$, năng lượng hoạt hoá của phản ứng là 100 kJ/mol. Ở 350 K, hằng số tốc độ của phản ứng là $8\cdot10^{-6}$ L/(mol·s). Tính hằng số tốc độ phản ứng ở 400 K.
2. Tính năng lượng hoạt hoá của một phản ứng biết rằng khi nhiệt độ tăng từ 300 K lên 310 K thì tốc độ phản ứng tăng 3 lần.
3. Thực nghiệm cho biết phản ứng: $2N_2O_5(g) \longrightarrow 4NO_2(g) + O_2(g)$ ở 45 °C có hằng số tốc độ phản ứng là $8{,}17\cdot10^{-3}$ s^{-1}; E_a = 103,5 kJ/mol. Tính hằng số tốc độ phản ứng tại 65 °C.

II CHẤT XÚC TÁC

1. Khái niệm chất xúc tác

Chất xúc tác là chất làm tăng tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về chất và lượng sau phản ứng.

Ví dụ 1: Hỗn hợp bột aluminium và iodine ở nhiệt độ thường không có phản ứng xảy ra, nhưng khi cho thêm một ít nước làm xúc tác, phản ứng xảy ra mãnh liệt, tạo hợp chất aluminium iodide. Nước là chất xúc tác, không cùng trạng thái với chất phản ứng nên thuộc loại xúc tác dị thể.

$$2Al(s) + 3I_2(s) \xrightarrow{H_2O} 2AlI_3(s)$$

Ví dụ 2: Khi đun nóng SO_2 với oxygen có mặt hỗn hợp ($NO + NO_2$), thu được SO_3 (các khí NO, NO_2 là chất xúc tác có cùng trạng thái với chất phản ứng nên thuộc loại xúc tác đồng thể).

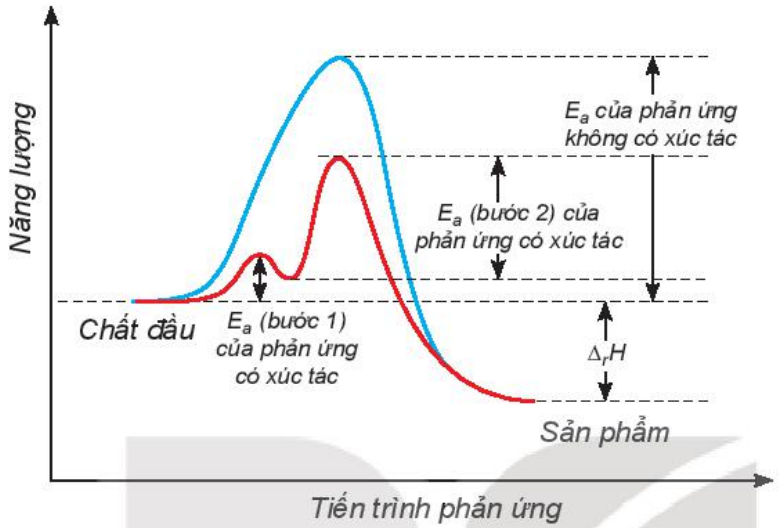
$$2SO_2(g) + O_2(g) \xrightarrow{NO + NO_2,\ t^o} 2SO_3(g)$$

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

2. Đặc điểm của chất xúc tác

- Chất xúc tác làm giảm năng lượng hoạt hoá của phản ứng.

  Hình 3.1 cho thấy xúc tác làm phản ứng xảy ra theo nhiều giai đoạn, mỗi giai đoạn đều có năng lượng hoạt hoá thấp hơn năng lượng hoạt hoá của phản ứng khi không có xúc tác, do đó làm tăng tốc độ phản ứng.



Hình 3.1. *Ảnh hưởng của xúc tác đến năng lượng hoạt hoá*

- Chất xúc tác làm tăng tốc độ phản ứng và không làm thay đổi chiều của phản ứng hoá học.
- Chất xúc tác có tính chọn lọc, mỗi chất xúc tác thường chỉ có tác dụng đối với phản ứng này mà không có tác dụng với phản ứng khác.

  Ví dụ: Enzyme xúc tác cho quá trình lên men đường thành acid lactic không làm xúc tác được cho quá trình lên men đường thành ethanol.

  Enzyme ureaza xúc tác cho quá trình thuỷ phân urea:

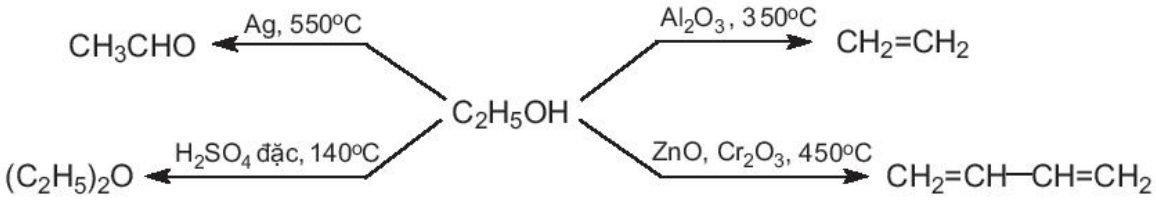
$$CO(NH_2)_2 + H_2O \longrightarrow CO_2 + 2NH_3$$

  nhưng không xúc tác cho sự thuỷ phân các dẫn xuất thế của urea.

3. Vai trò của chất xúc tác

- Chất xúc tác được sử dụng làm tăng tốc độ các phản ứng hoá học trong sản xuất công nghiệp. Ví dụ: platinium (Pt), vanadium pentoxide (V_2O_5) được sử dụng trong quá trình oxi hoá SO_2 thành SO_3 để sản xuất sulfuric acid; bột iron (Fe) được hoạt hoá là xúc tác cho quá trình tổng hợp ammonia (NH_3) từ nitrogen và hydrogen; platinium (Pt) dùng làm chất xúc tác cho quá trình oxi hoá ammonia (NH_3) thành nitrogen oxide (NO) để sản xuất nitric acid.
- Quy trình sản xuất có thể được cải tiến bằng cách lựa chọn các chất xúc tác thích hợp. Sơ đồ dưới đây cho thấy từ nguyên liệu ethanol, tuỳ thuộc vào chất xúc tác được chọn và điều kiện phản ứng sẽ thu được các sản phẩm khác nhau.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG



Về mặt định lượng, có thể thấy vai trò của chất xúc tác khi áp dụng phương trình Arrhenius cho hai trường hợp có và không có xúc tác của cùng một phản ứng.

Kí hiệu hằng số tốc độ của phản ứng không có xúc tác là k_o và phản ứng có xúc tác là k_x. Theo phương trình Arrhenius:

$$k_o = A \cdot e^{-\frac{E_a^o}{RT}}$$

$$\text{và } k_x = A \cdot e^{-\frac{E_a^x}{RT}}$$

Ví dụ: Giả thiết một phản ứng xảy ra ở 600 K, khi có xúc tác năng lượng hoạt hoá giảm so với khi không có xúc tác là 41 900 J/mol.

$$\text{Tỉ số: } \frac{k_x}{k_o} = e^{\frac{(E_a^o - E_a^x)}{RT}} = e^{\frac{\Delta E}{RT}}$$

$$= e^{\frac{41900}{8{,}314 \cdot 600}} = e^{8{,}4} \approx 4\,445$$

Như vậy, tốc độ phản ứng có xúc tác (k_x) lớn hơn 4 445 lần tốc độ phản ứng không có xúc tác (k_o).

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

4. Sự suy giảm tầng ozone và lỗ thủng tầng ozone (O_3) đã gây ra mối lo ngại về việc gia tăng nguy cơ ung thư da, cháy nắng, mù mắt và đục thuỷ tinh thể,... Tầng ozone ngăn chặn hầu hết các bước sóng có hại của tia cực tím (UV) đi qua bầu khí quyển Trái Đất. Các phân tử ozone có thể bị phá huỷ theo hai giai đoạn:

$$Cl + O_3 \longrightarrow ClO + O_2$$

$$\text{và } ClO + O_3 \longrightarrow Cl + 2O_2$$

Chất xúc tác trong các quá trình này là chất nào?

5. Một phản ứng xảy ra ở 500 °C, năng lượng hoạt hoá của phản ứng khi không có xúc tác và khi có xúc tác lần lượt là 55,4 kJ/mol và 13,5 kJ/mol. Chứng minh rằng chất xúc tác có ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng.

EM ĐÃ HỌC

- Năng lượng hoạt hoá (E_a) là năng lượng tối thiểu mà các chất phản ứng cần có để phản ứng hoá học xảy ra được.
- Theo phương trình Arrhenius: $k = A.e^{-\frac{E_a}{RT}}$, khi E_a giảm hoặc T tăng thì k tăng nên tốc độ phản ứng tăng.
- Chất xúc tác là chất làm thay đổi tốc độ phản ứng nhưng không bị biến đổi về chất và lượng sau phản ứng.
- Vai trò của chất xúc tác:

  – Làm giảm năng lượng hoạt hoá nên làm tăng tốc độ phản ứng.

  – Có tính chọn lọc.

EM CÓ THỂ

Vận dụng khái niệm năng lượng hoạt hoá để giải thích vai trò của xúc tác trong một số quá trình tự nhiên như: tiêu hoá thức ăn trong cơ thể người, động vật,... và một số quá trình sản xuất: sulfuric acid, acetic acid, rượu, bia,...

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

BÀI 4

ENTROPY VÀ BIẾN THIÊN NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm về entropy.
- Nêu được ý nghĩa của dấu và trị số của biến thiên năng lượng tự do Gibbs (Δ_rG^o).
- Tính được Δ_rG^o từ bảng cho sẵn các giá trị Δ_fH^o và S^o của các chất.

Dựa vào đại lượng nào để dự đoán phản ứng hoá học có thể xảy ra được hay không?

I ENTROPY

1. Entropy và mức độ mất trật tự trong hệ vĩ mô

Entropy (kí hiệu là S) là thước đo mức độ hỗn loạn (mất trật tự) của hệ chứa số lượng lớn hạt như nguyên tử, phân tử hoặc ion. Entropy gắn với độ tự do trong chuyển động của các phân tử, độ tự do chuyển động càng cao thì entropy càng lớn. Đối với một chất, entropy ở thể khí lớn hơn ở thể lỏng, ở thể lỏng lớn hơn ở thể rắn. Khi chuyển chất từ thể khí sang thể lỏng và sang thể rắn, mức độ tự do chuyển động giảm (cả về tốc độ và hướng chuyển động) nên entropy giảm. Ngược lại khi chất rắn nóng chảy (hay thăng hoa) và khi chất lỏng sôi (bay hơi), chuyển động hỗn loạn của các hạt tăng, làm tăng entropy của hỗn hợp.

Người ta quy ước một chất rắn lí tưởng ở độ không tuyệt đối (0 K) có entropy bằng 0.

Người ta đã xác định được entropy cho các chất thông dụng ở điều kiện tiêu chuẩn: 298 K và 1 bar, được kí hiệu S^o_{298} (đơn vị thường là $J{\cdot}mol^{-1}{\cdot}K^{-1}$) (xem Bảng 4.1).

2. Biến thiên entropy trong phản ứng hoá học

Khi phản ứng hoá học xảy ra, biến thiên entropy của phản ứng được tính bằng tổng entropy của các chất sản phẩm phản ứng (viết tắt là sp) trừ đi tổng entropy của các chất tham gia phản ứng (viết tắt là cđ).

$$\Delta_rS = \sum S(sp) - \sum S(cđ)$$

Ở điều kiện chuẩn (298K, 1 bar): $\Delta_rS^o_{298} = \sum S^o_{298}(sp) - \sum S^o_{298}(cđ)$

Các phản ứng hoá học làm tăng số mol khí thường có biến thiên entropy dương ($\Delta S > 0$), các phản ứng làm giảm số mol khí thường có biến thiên entropy âm ($\Delta S < 0$), các phản ứng hoá học không làm thay đổi số mol khí hoặc phản ứng không có chất khí sẽ có biến thiên entropy nhỏ.

Ví dụ 1: Phản ứng khử:

$$CO_2(g) + C(\text{graphite}) \longrightarrow 2CO(g)$$

Từ 1 mol khí CO_2 tạo ra 2 mol khí CO, nên số mol khí tăng.

$\Delta_r S^o_{298} = (2 \cdot 197{,}54) - (213{,}68 + 5{,}74)$

$= 175{,}66$ (J/K).

Ví dụ 2: Phản ứng oxi hoá:

$$2H_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2H_2O(g)$$

Từ 3 mol khí ($H_2 + O_2$) tạo ra 2 mol khí H_2 nên số mol khí giảm.

$\Delta_r S^o_{298} = (2 \cdot 188{,}72) - (2 \cdot 130{,}52 + 205{,}04)$

$= -88{,}64$ (J/K).

Ví dụ 3: $C(\text{graphite}) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g)$.

Từ 1 mol khí O_2 tạo ra 1 mol khí CO_2, nên số mol khí không đổi.

$\Delta_r S^o_{298} = 213{,}68 - (205{,}04 + 5{,}74)$

$= 2{,}90$ (J/K).

1. Dãy nào dưới đây các chất sắp xếp theo chiều tăng giá trị entropy chuẩn?
   A. $CO_2(s) < CO_2(l) < CO_2(g)$.
   B. $CO_2(g) < CO_2(l) < CO_2(s)$.
   C. $CO_2(s) < CO_2(g) < CO_2(l)$.
   D. $CO_2(g) < CO_2(s) < CO_2(l)$.
2. Phản ứng nào dưới đây xảy ra kèm theo sự giảm entropy?
   A. $N_2(g) + O_2(g) \longrightarrow 2NO(g)$.
   B. $N_2O_4(g) \longrightarrow 2NO_2(g)$.
   C. $2CO(g) \longrightarrow C(s) + CO_2(g)$.
   D. $2HCl(aq) + Fe(s) \longrightarrow FeCl_2(aq) + H_2(g)$.
3. Biến thiên entropy chuẩn của phản ứng nào dưới đây có giá trị dương?
   A. $Ag^+(aq) + Br^-(aq) \longrightarrow AgBr(s)$.
   B. $2C_2H_6(g) + 3O_2(g) \longrightarrow 4CO_2(g) + 6H_2O(l)$.
   C. $N_2(g) + 2H_2(g) \longrightarrow N_2H_4(g)$.
   D. $2H_2O_2(l) \longrightarrow 2H_2O(l) + O_2(g)$.
4. Dựa vào dữ liệu ở Bảng 4.1, tính biến thiên entropy chuẩn của các phản ứng:
   a) $4Fe(s) + 3O_2(g) \longrightarrow 2Fe_2O_3(s)$
   b) $SO_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \longrightarrow SO_3(g)$

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

II NĂNG LƯỢNG TỰ DO GIBBS

Trong tự nhiên, các quá trình tự diễn biến xảy ra theo xu hướng: làm giảm enthalpy ($\Delta H < 0$), làm tăng entropy ($\Delta S > 0$). Khi xét quá trình hoá học có tự xảy ra hay không phải xét đồng thời cả biến thiên enthalpy và biến thiên entropy, thông qua biến thiên *năng lượng Gibbs* (ΔG) (ở nhiệt độ và áp suất không đổi).

$$\Delta_r G_T^o = \Delta_r H_T^o - T \cdot \Delta_r S_T^o$$

Trong đó: $\Delta_r H_T^o$ là biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T;

$\Delta_r S_T^o$ là biến thiên entropy chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T;

T là nhiệt độ tại đó xảy ra phản ứng (theo thang Kelvin);

$\Delta_r G_T^o$ là biến thiên năng lượng tự do Gibbs chuẩn của phản ứng ở nhiệt độ T.

Dựa vào $\Delta_r G_T^o$ có thể dự đoán hoặc giải thích được chiều hướng của một phản ứng hoá học ở nhiệt độ T:

$\Delta_r G_T^o < 0$ phản ứng sẽ tự xảy ra, giá trị $\Delta_r G_T^o$ càng âm, phản ứng càng dễ xảy ra.

$\Delta_r G_T^o = 0$ phản ứng đạt trạng thái cân bằng.

$\Delta_r G_T^o > 0$ phản ứng không tự xảy ra.

Bảng 4.1. *Giá trị entropy chuẩn và enthalpy hình thành chuẩn của một số chất*(*)

Chất	S_{298}^o (J/mol·K)	$\Delta_f H_{298}^o$ (kJ/mol)	Chất	S_{298}^o (J/mol·K)	$\Delta_f H_{298}^o$ (kJ/mol)
C(graphite)	5,7	–	$H_2(g)$	130,6	–
CO(g)	197,5	– 110,5	$H_2O(g)$	188,7	– 241,8
$CO_2(g)$	213,7	– 393,5	NO(g)	210,7	90,3
CaO(s)	38,2	– 635,1	$NO_2(g)$	239,9	33,2
$CaCO_3(s)$	92,9	– 1 206,9	$N_2O_4(g)$	304,3	9,2
Fe(s)	27,3	–	$O_2(g)$	205,0	–
$Fe_2O_3(s)$	87,4	– 825,5	S(g)	168,0	279,0
KCl(s)	82,6	– 436,7	$SO_2(g)$	248,1	– 296,8
$KClO_3(s)$	143,1	– 397,7	$SO_3(g)$	256,7	– 396,0

Ví dụ 1: Phản ứng $CaCO_3(s) \xrightarrow{t^o} CaO(s) + CO_2(g)$ ở 298 K và 1 bar

có $\Delta_r H_{298}^o = -(635,1 + 393,5) - (-1\,206,9) = 178,3$ (kJ)

và $\Delta_r S_{298}^o = (213,7 + 38,2) - 92,9 = 159,0$ (J/K)

nên $\Delta_r G_{298}^o = 178,3 - (298 \cdot 0,1509) \approx 130,9$ (kJ) > 0

Như vậy, ở điều kiện chuẩn (25 °C, 1 bar), $CaCO_3$ không bị phân huỷ.

(*) *Nguồn: Silberberg, Martin. (2018). Chemistry: the molecular nature of matter and change with advanced topics. McGraw-Hill Education.*

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Ví dụ 2: Phản ứng $2NO(g) + O_2(g) \longrightarrow 2NO_2(g)$ ở 298K và 1 bar.

Có $\Delta_r H^o_{298} = (2 \cdot 33{,}2) - 0 - (2 \cdot 90{,}3) = -114{,}2$ kJ

và $\Delta_r S^o_{298} = (2 \cdot 239{,}9) - (2 \cdot 210{,}7) - (205{,}0) = -146{,}6$ (J/K)

nên $\Delta_r G^o_{298} = -114\,200 - (-146{,}6 \cdot 298)$

$= -70513{,}2$ J $\approx -70{,}5$ kJ $\Rightarrow$ Phản ứng tự xảy ra ở 298K.

5. Phản ứng phân huỷ của potassium chlorate:

$$KClO_3(s) \longrightarrow KCl(s) + \frac{3}{2}O_2(g)$$

Dựa vào các giá trị của $\Delta_f H^o_{298}$, S^o_{298} ở Bảng 4.1 để tính toán và cho biết ở điều kiện chuẩn phản ứng có khả năng tự xảy ra ở 25 °C không?

6. Dựa vào các giá trị của $\Delta_f H^o_{298}$, S^o_{298} ở Bảng 4.1, hãy cho biết có thể dùng C (graphite) để khử Fe_2O_3 thành Fe ở điều kiện chuẩn và 25 °C theo phương trình sau được không?

$$3C(\text{graphite}) + 2Fe_2O_3(s) \longrightarrow 4Fe(s) + 3CO_2(g)$$

EM ĐÃ HỌC

- Entropy (S) là thước đo mức độ hỗn loạn (mất trật tự) của hệ chứa số lượng lớn hạt như nguyên tử, phân tử hoặc ion. Độ tự do chuyển động của các hạt càng lớn thì entropy càng cao.
- Biến thiên entropy trong phản ứng hoá học:

$$\Delta_r S^o = \Sigma S^o(sp) - \Sigma S^o(cđ)$$

- Biến thiên năng lượng tự do Gibbs: $\Delta_r G^o_T = \Delta_r H^o_T - T.\Delta_r S^o_T$.
- Ý nghĩa của dấu và trị số biến thiên $\Delta_r G^o_T$:
  - $\Delta_r G^o_T < 0 \Rightarrow$ Phản ứng tự xảy ra.
  - $\Delta_r G^o_T = 0 \Rightarrow$ Phản ứng đạt trạng thái cân bằng.
  - $\Delta_r G^o_T > 0 \Rightarrow$ Phản ứng không tự xảy ra.

EM CÓ THỂ

Xác định được $\Delta_r G^0_{298}$ từ các giá trị S^o_{298} và $\Delta_f H^o_{298}$ và suy ra xu hướng tự xảy ra của các phản ứng hoá học.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

CHUYÊN ĐỀ 2

HOÁ HỌC TRONG VIỆC PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ

BÀI 5

SƠ LƯỢC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm, đặc điểm của phản ứng cháy và một số ví dụ về sự cháy một số chất vô cơ, hữu cơ.
- Nêu được điều kiện cần và đủ để phản ứng cháy xảy ra.
- Nêu được khái niệm, đặc điểm cơ bản của phản ứng nổ, phản ứng nổ vật lí, phản ứng nổ hoá học.
- Trình bày được khái niệm về "nổ bụi".
- Trình bày được những sản phẩm độc hại thường sinh ra trong các phản ứng cháy và tác hại của chúng với con người.

Phản ứng cháy, nổ xảy ra phổ biến trong tự nhiên, đời sống và sản xuất. Dựa vào đặc tính của vật liệu, con người có thể điều khiển quá trình cháy, nổ xảy ra đúng mục đích, an toàn. Ngược lại, một vụ cháy, nổ bất ngờ, ngoài tầm kiểm soát có thể gây thiệt hại lớn về người và tài sản. Vậy, phản ứng cháy, nổ là gì? Chúng xảy ra khi hội tụ đủ các yếu tố nào?

VỚI CUỘC SỐNG

I PHẢN ỨNG CHÁY

1. Khái niệm

Phản ứng cháy là phản ứng oxi hoá – khử có toả nhiệt và phát sáng.

Xét về bản chất, cháy là phản ứng hoá học giữa các chất cháy với oxygen có trong không khí hoặc với một chất oxi hoá khác kèm theo sự toả nhiệt và phát sáng. Phản ứng cháy của một số chất vô cơ và hữu cơ được liệt kê ở Bảng 5.1.

Bảng 5.1. *Phản ứng cháy của một số chất vô cơ và hữu cơ*

Chất cháy	Phản ứng hoá học
Than đá	$C + O_2 \xrightarrow{t^o} CO_2$
Xăng	$2C_8H_{18} + 25O_2 \xrightarrow{t^o} 16CO_2 + 18H_2O$
Dầu diesel	$2C_{14}H_{30} + 43O_2 \xrightarrow{t^o} 28CO_2 + 30H_2O$
Magnesium	$2Mg + CO_2 \xrightarrow{t^o} 2MgO + C$

2. Đặc điểm

Hình 5.1. *Đốt cháy than củi*

Phản ứng cháy luôn xảy ra với ba dấu hiệu đặc trưng là (1) có xảy ra phản ứng hoá học, (2) có toả nhiệt và (3) có phát sáng.

Khi đốt cháy, một chuỗi các phản ứng hoá học xảy ra nối tiếp nhau và nhiệt độ ngọn lửa được duy trì bởi chính nhiệt toả ra từ phản ứng cháy. Sự cháy sẽ tiếp diễn nếu vẫn còn nhiên liệu và có nguồn cung cấp oxygen liên tục.

Khi cháy, do quá trình đối lưu, sản phẩm cháy như khí, tro, bụi bay ra, đồng thời oxygen xâm nhập vào để ngọn lửa tiếp tục cháy.

3. Điều kiện cần và đủ để phản ứng cháy xảy ra

Để phản ứng cháy xảy ra cần có đủ ba yếu tố: chất cháy, chất oxi hoá và nguồn nhiệt. Trong đó, chất cháy và chất oxi hoá đóng vai trò chất phản ứng, còn nguồn nhiệt cung cấp năng lượng ban đầu cho phản ứng cháy xảy ra. Nếu thiếu một trong các yếu tố này thì phản ứng cháy sẽ không xảy ra.

Hình 5.2. *Tam giác cháy – ba điều kiện cần để đám cháy xảy ra*

Ba yếu tố trong tam giác cháy bao gồm:

- *Chất cháy:* là chất có thể cháy được, điển hình là nhiên liệu. Chất cháy có thể tồn tại ở ba thể: thể rắn (than, gỗ, tre, nứa, nhựa, cao su,…), thể lỏng (xăng, dầu, alcohol,…), thể khí (khí thiên nhiên, khí gas, hydrogen, acetylene,…).
- *Chất oxi hoá:* là chất gây cháy, thường là oxygen. Oxygen chiếm khoảng 21% thể tích không khí và tham gia vào hầu hết các phản ứng cháy trong tự nhiên. Một số chất khác cũng có thể đóng vai trò là chất oxi hoá như muối nitrate, muối chlorate.Trong một số trường hợp đặc biệt, chất oxi hoá là nước, hơi nước, khí carbon dioxide.
- *Nguồn nhiệt:* cung cấp nhiệt hoặc gây bắt lửa như tàn thuốc lá đỏ, hàn xì, chập điện, ma sát, sự đốt nóng, tiếp xúc nhiệt, …

a) Biểu tượng chất cháy

b) Biểu tượng chất oxi hoá

Hình 5.3. *Một số biểu tượng sử dụng trong phòng cháy, chữa cháy*

Ví dụ: một đám cháy than có thể xảy ra khi có than (chất cháy), oxygen không khí (chất oxi hoá) và có một lượng nhiệt được cung cấp ban đầu.

Tuy nhiên, đám cháy chỉ xuất hiện khi có thêm ba điều kiện đủ:

- Nồng độ oxygen trong không khí phải lớn hơn 14% thể tích (ngoại trừ đối với một số chất cháy gây nổ mạnh như hydrogen, methane, acetylene,…).
- Nguồn nhiệt phải đủ đưa hỗn hợp cháy đến nhiệt độ bắt lửa của chất cháy.
- Thời gian tiếp xúc của chất cháy, chất oxi hoá và nguồn nhiệt đủ lâu để chất cháy bắt lửa.

4. Sản phẩm cháy

Sản phẩm của quá trình cháy phụ thuộc vào bản chất của chất cháy, chất oxi hoá và đặc điểm quá trình cháy hoàn toàn hay không hoàn toàn.

- Quá trình cháy hoàn toàn: Nếu đủ hoặc thừa oxygen thì quá trình cháy thường xảy ra hoàn toàn, các nguyên tố hoá học trong chất cháy được chuyển hoá thành các sản phẩm bền và không còn khả năng cháy tiếp.
- Quá trình cháy không hoàn toàn: Nếu thiếu oxygen hoặc nồng độ oxygen thấp thì quá trình cháy sẽ xảy ra không hoàn toàn. Khi đó, sản phẩm cháy vẫn còn chứa các sản phẩm độc hại và còn có khả năng cháy tiếp như hơi nhiên liệu, muội than, carbon monooxide,...

Các sản phẩm quá trình cháy thường gây ô nhiễm môi trường đất, nước, không khí và ảnh hưởng xấu đến sức khoẻ con người (Bảng 5.2).

Bảng 5.2. *Tác hại của một số sản phẩm cháy đến sức khoẻ và môi trường*

Sản phẩm	Tác hại
CO_2	Không khí chứa nhiều CO_2 sẽ gián tiếp gây thiếu oxygen cho quá trình hô hấp, gây hôn mê, bại não (Ví dụ: đun bếp than trong phòng kín, làm việc gần lò nung vôi thủ công đang hoạt động,...). CO_2 là nguyên nhân chính làm tăng hiệu ứng nhà kính, gây hiện tượng nóng lên toàn cầu.
CO	CO có khả năng kết hợp với hemoglobin trong hồng cầu, làm giảm khả năng vận chuyển O_2. Con người sẽ bị bất tỉnh sau vài giây và tử vong sau vài phút nếu hít thở không khí có chứa 1,28% thể tích là khí CO.
SO_2	SO_2 ở nồng độ thấp có thể gây co thắt phế quản, ở nồng độ cao gây viêm niêm mạc đường hô hấp, ảnh hưởng đến chức năng của phổi. SO_2 là nguyên nhân chính gây mưa acid, có thể làm chết cây cối, ăn mòn các công trình kiến trúc bằng đá và kim loại.
NO_2	Hít thở không khí chứa nhiều NO_2 gây tổn thương niêm mạc phổi, ảnh hưởng đến chức năng của phổi, mắt, mũi, họng. NO_2 và các oxide của nitrogen là tác nhân gây mưa acid, gây thủng tầng ozone.
HCl	HCl gây ngứa da, ho, chảy nước mắt. Nếu bị nhiễm nặng có thể đau đầu hoặc gây tổn thương phổi.
Khói, bụi mịn, bồ hóng	Khói, bụi mịn, bồ hóng khi xâm nhập vào phổi sẽ dẫn đến các bệnh về hô hấp. Bên cạnh đó, khói, bụi mịn, bồ hóng còn có thể gây ra các bệnh ở mắt, da, tim mạch,... Bụi mịn cũng là một trong các tác nhân gây ung thư.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

1. Trình bày khái niệm và các đặc điểm cơ bản của phản ứng cháy.
2. Tính năng suất toả nhiệt của một loại than đá theo đơn vị kJ/kg, biết than đá chứa 84% khối lượng carbon và giả thiết toàn bộ nhiệt lượng toả ra khi đốt than đá đều sinh ra từ phản ứng:

$$C(s) + O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) \qquad \Delta H^o = -394 \text{ kJ/mol}$$

3. Than tổ ong hiện vẫn được một số nơi sử dụng để đun nấu. Một viên than tổ ong nặng 1 200 g có chứa 40% carbon về khối lượng.

   a) Tính số mol carbon có trong một viên than tổ ong.

   b) Tính thể tích khí CO_2 tạo ra ở điều kiện chuẩn khi đốt cháy hoàn toàn viên than trên. Tại sao hiện nay các nhiên liệu hoá thạch được khuyến cáo hạn chế sử dụng trên toàn thế giới?

   c) Tại sao đun bếp than tổ ong trong phòng ngủ để sưởi ấm có thể gây hôn mê, bại não?
4. Một loại gas dùng làm nhiên liệu đun nấu có thành phần chính gồm C_3H_8 và C_4H_{10} theo tỉ lệ mol tương ứng là 2 : 3.

   a) Tính phần trăm thể tích mỗi alkane trên trong khí gas.

   b) Tính phân tử khối trung bình của khí gas. Khí gas nặng hơn không khí bao nhiêu lần? Tại sao sau khi hơi gas rò rỉ sẽ tích tụ ở những nơi thấp trên mặt đất?

II PHẢN ỨNG NỔ

1. Khái niệm

Phản ứng nổ là phản ứng xảy ra với tốc độ rất nhanh, mạnh, toả nhiều nhiệt và ánh sáng, gây ra sự tăng thể tích đột ngột, tạo ra tiếng nổ mạnh.

Ví dụ: các vụ nổ do thuốc nổ, bom, mìn, đạn pháo cỡ lớn, bộc phá, thuỷ lôi, xăng dầu, bình gas, trạm điện.

Về bản chất, một vụ nổ là sự giải phóng năng lượng đột ngột, toả ra môi trường xung quanh, tạo thành sóng âm, gọi là sóng nổ hoặc sóng xung kích. Một vụ nổ thường gây thiệt hại bởi âm thanh lớn, nhiệt lượng, ánh sáng và sóng nổ.

Sóng nổ là sóng phát ra từ tâm vụ nổ, lan truyền ra môi trường xung quanh với một áp suất rất cao. Sóng nổ gây ra các chấn thương do các mảnh vỡ và do áp lực lớn tác động lên cơ thể, đặc biệt trong môi trường nước và không khí. Sóng nổ sinh ra từ các vụ nổ hạt nhân có sức tàn phá khủng khiếp nhất.

Hình 5.4. *Một vụ nổ bom hạt nhân*

2. Đặc điểm

Phản ứng nổ có các đặc điểm sau:

- Tốc độ phản ứng nhanh: Phản ứng xảy ra rất nhanh trong khoảng thời gian rất ngắn. Đây là đặc điểm khác biệt so với phản ứng cháy và phản ứng hoá học thông thường.
- Toả nhiều nhiệt: Sự toả nhiệt mạnh là điều kiện để duy trì phản ứng nổ. Phản ứng toả càng nhiều nhiệt thì tốc độ phản ứng càng cao, phản ứng càng triệt để, tốc độ lan truyền càng nhanh, sức công phá càng lớn.

- Tạo áp suất cao: Áp suất gây ra ở tâm nổ rất cao, trong một vụ nổ, nếu lượng khí sinh ra càng nhiều và nhiệt độ càng cao thì sức tàn phá càng lớn.

  Vụ nổ có thể sử dụng với mục đích xây dựng (phá đá, đào hầm, phá dỡ công trình), mục đích giải trí (pháo hoa, pháo sáng,...),...

EM CÓ BIẾT

Đương lượng nổ

Năng lượng được giải phóng ra từ vụ nổ gọi là sức công phá, hay đương lượng nổ, được xác định theo thang đo của thuốc nổ TNT.

Bảng 5.3. *Kí hiệu đương lượng nổ và giá trị năng lượng tương ứng*

Khối lượng TNT	Đương lượng nổ	Năng lượng (kJ)
1 kg	militon	$4{,}18 \cdot 10^3$
1 tấn	ton	$4{,}18 \cdot 10^6$
1 000 tấn	kiloton	$4{,}18 \cdot 10^9$
1 triệu tấn	megaton	$4{,}18 \cdot 10^{12}$
1 tỉ tấn	gigaton	$4{,}18 \cdot 10^{15}$

Sức công phá của bom nguyên tử

Trong chiến tranh thế giới thứ hai, quân đội Mỹ đã ném hai quả bom nguyên tử xuống thành phố Hiroshima và Nagasaki vào ngày 6 và ngày 9 tháng 8 năm 1945.

Quả bom ném xuống Hiroshima chứa nguyên tố phóng xạ ^{235}U, phát nổ ở cách mặt đất khoảng 600 m với đương lượng nổ 13 đến 16 kiloton. Vụ nổ ngay lập tức giết chết hàng chục nghìn người và sau đó còn hàng chục nghìn người chết do vết thương, nhiễm độc phóng xạ và gây ra hậu quả di truyền cho nhiều người đến tận ngày nay.

Với sức tàn phá huỷ diệt, vũ khí hạt nhân đang bị thế giới lên án. Hiệp ước cấm vũ khí hạt nhân của Liên Hợp Quốc có hiệu lực từ ngày 22 tháng 1 năm 2021, trong đó cấm sử dụng, phát triển, sản xuất, thử nghiệm, dự trữ và đe doạ sử dụng vũ khí hạt nhân.

3. Phân loại

Các vụ nổ được phân làm ba loại: nổ vật lí, nổ hoá học và nổ hạt nhân.

- Nổ vật lí là nổ do sự giải phóng thể tích đột ngột sau khi vật chất bị nén dưới một áp suất cao. Ví dụ: nổ bình khí nén, nổ đường ống dẫn khí nén, nổ săm xe khi bơm quá căng. Trong vụ nổ vật lí không xảy ra các phản ứng hoá học.
- Nổ hoá học là nổ do sự giải phóng rất nhanh năng lượng hoá học dự trữ trong các phân tử thành động năng, nhiệt năng, ánh sáng, âm thanh,... Ví dụ: nổ bom, mìn, thuốc nổ, gas, hydrogen, methane, acetylene,... Nổ hoá học bắt nguồn từ các phản ứng hoá học và thường phức tạp hơn nhiều so với nổ vật lí.

- Nổ hạt nhân là vụ nổ gây ra bởi phản ứng nhiệt hạch hoặc phản ứng phân hạch. Các phản ứng hạt nhân kèm theo giải phóng nhiệt lượng rất lớn.

4. Nổ bụi

Nổ bụi là vụ nổ gây ra bởi quá trình bốc cháy nhanh của các hạt bụi mịn phân tán trong không khí bên trong một không gian hạn chế, tạo ra sóng nổ. Nổ bụi có khả năng gây sát thương cho nhiều người và có thể làm sụp đổ một phần hay toàn bộ công trình, tương tự như nổ khí. Nổ bụi là một trường hợp của nổ hoá học.

Hình 5.5. *Một vụ nổ bụi công nghiệp*

Nổ bụi xảy ra khi có đủ năm yếu tố: nguồn oxygen, nguồn nhiệt, nhiên liệu (bụi có thể cháy được), nồng độ bụi mịn đủ lớn và không gian đủ kín. Thiếu một trong các yếu tố trên sẽ không hình thành vụ nổ bụi.

Các hạt bụi rắn gây ra "nổ bụi" hầu hết là các vật liệu hữu cơ hoặc vô cơ ở dạng rắn, có khả năng bốc cháy trong không khí và toả nhiệt mạnh. Ví dụ: vật liệu hữu cơ như bột ngũ cốc (ngô, bột mì, bột gạo,...), bột đường, bột nhựa, bột gỗ, bột vải, bột cao su, bột dược phẩm,...; vật liệu vô cơ như bột kim loại (aluminium, magnesium, zinc, iron,...), bột phi kim (than, sulfur, phosphorus, silicon,...).

5. Hiện tượng nào sau đây là nổ vật lí? Hiện tượng nào là nổ hoá học?

a) Nổ quả bóng bay do bơm quá căng.

b) Nổ chùm bóng bay chứa khí hydrogen do bắt lửa.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

EM ĐÃ HỌC

- Phản ứng cháy là phản ứng oxi hoá – khử có kèm theo toả nhiệt và phát sáng. Để xuất hiện một đám cháy cần hội tụ đủ ba yếu tố: chất cháy, chất oxi hoá và nguồn nhiệt.
- Phản ứng nổ là phản ứng xảy ra với tốc độ rất nhanh, kèm theo sự tăng thể tích đột ngột và giải phóng năng lượng lớn.
- Các sản phẩm của phản ứng cháy, nổ như CO_2, CO, SO_2, NO_x gây ảnh hưởng xấu đến sức khoẻ và môi trường.

EM CÓ THỂ

- Viết phản ứng hoá học xảy ra với các chất cháy thông dụng, tính toán lượng không khí cần thiết cho quá trình đốt cháy.
- Dựa vào bản chất của chất cháy, nhận biết nguy cơ gây cháy, nổ để có biện pháp phòng ngừa và chữa cháy phù hợp.

BÀI 6

ĐIỂM CHỚP CHÁY . NHIỆT ĐỘ NGỌN LỬA NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY

MỤC TIÊU

- Nêu được khái niệm về điểm chớp cháy.
- Trình bày được việc sử dụng điểm chớp cháy để phân biệt chất lỏng dễ cháy và có thể gây cháy.
- Trình bày được khái niệm nhiệt độ ngọn lửa và nhiệt độ tự bốc cháy.

Tại các trạm bán xăng dầu, yêu cầu về an toàn cháy, nổ được đặt lên hàng đầu. Khi vào đổ xăng, chúng ta phải tuân thủ các biển báo cấm lửa, cấm hút thuốc vì xăng là chất lỏng dễ bay hơi và bắt lửa ngay ở nhiệt độ thường. Vậy, những loại nhiệt độ giới hạn nào được sử dụng để cảnh báo nguy cơ cháy, nổ của một chất lỏng cháy dễ bay hơi?

Hình biển báo cấm lửa

I ĐIỂM CHỚP CHÁY

Điểm chớp cháy (flash point), hay nhiệt độ chớp cháy, là một thông số quan trọng đánh giá khả năng gây cháy của vật liệu. Đây là tiêu chí đánh giá khả năng gây cháy của chất lỏng dễ cháy trong không khí, từ đó đánh giá sự an toàn, nguy cơ hoả hoạn của từng nhiên liệu.

1. Khái niệm

Điểm chớp cháy của chất cháy là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà chất cháy bị đốt nóng tới mức tạo ra lượng hơi đủ lớn để bốc cháy trong không khí khi gặp nguồn lửa.

Khi nhiệt độ tăng, áp suất hơi của nhiên liệu tăng. Tại điểm chớp cháy, ngọn lửa bùng lên rồi tắt ngay vì hơi nhiên liệu tạo ra chưa đủ để duy trì sự cháy. Khái niệm điểm chớp cháy thường dùng cho các chất cháy là chất lỏng dễ bay hơi và dễ cháy.

Điểm chớp cháy của một số chất cháy là nhiên liệu được liệt kê ở Bảng 6.1.

***Bảng 6.1.** Điểm chớp cháy của một số nhiên liệu(*)*

Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)	Nhiên liệu	Điểm chớp cháy (°C)
Propane	−105	Ethylene glycol	111
Pentane	−49	Diethyl ether	−45
Hexane	−22	Acetaldehyde	−39
Benzene	−11	Acetone	−20
Nitrobenzene	88	Formic acid	50
Ethanol	13	Stearic acid	196
Methanol	11	Triethylamine	−7

(*) *Nguồn: John B. Durkee. (2008). Developments in Surface Contamination and Cleaning. William Andrew.*

2. Đặc điểm

Điểm chớp cháy là một yếu tố để đánh giá nguy cơ về hoả hoạn của vật liệu. Điểm chớp cháy được sử dụng để phân biệt chất lỏng dễ cháy với chất lỏng có thể gây cháy. Chất lỏng có điểm chớp cháy nhỏ hơn 37,8 °C gọi là chất lỏng dễ cháy, chất lỏng có điểm chớp cháy lớn hơn 37,8 °C gọi là chất lỏng có thể gây cháy.

Điểm chớp cháy giúp nhận biết sự có mặt của các vật liệu dễ bay hơi và dễ bốc cháy có lẫn trong các loại vật liệu ít bay hơi hoặc không dễ bắt cháy. Ví dụ: Một mẫu dầu diesel có điểm chớp cháy thấp bất thường có thể do chứa tạp chất là xăng.

1. a) Hãy phân loại các chất lỏng trong Bảng 6.1 thành hai loại: loại chất lỏng dễ cháy và loại chất lỏng có thể gây cháy.

   b) Tại sao không phải tất cả các chất lỏng đều có điểm chớp cháy?

3. Tại sao nghiêm cấm nguồn lửa tại các trạm xăng, biết điểm chớp cháy của octane, chất có nhiều trong xăng là 14 °C.

3. Khi sử dụng cồn để đốt, nếu không cẩn thận có thể bị bỏng cồn.

   a) Những đặc điểm nào sau đây tiềm ẩn nguy cơ gây bỏng cồn: cồn dễ bay hơi, hơi cồn dễ bắt lửa, phản ứng toả nhiệt mạnh, nhiệt độ ngọn lửa cao?

   b) Nêu các biện pháp đảm bảo an toàn khi dùng cồn để đốt.

II NHIỆT ĐỘ NGỌN LỬA

1. Khái niệm

Nhiệt độ ngọn lửa (flame temperature) là nhiệt độ cao nhất tạo ra bởi phản ứng đốt cháy chất cháy ở áp suất khí quyển.

Nhiệt độ ngọn lửa thường được xác định bằng lí thuyết trong điều kiện thực hiện phản ứng đốt cháy chất cháy ở áp suất khí quyển và hệ phản ứng không trao đổi nhiệt với môi trường.

2. Đặc điểm

Nhiệt độ ngọn lửa phản ánh mức độ toả nhiệt của phản ứng đốt cháy. Với chất cháy là nhiên liệu, phản ứng đốt cháy thường kèm theo toả nhiệt mạnh, đồng thời tạo ra nhiệt độ ngọn lửa cao đáp ứng được các yêu cầu thực tiễn trong sản xuất, đời sống. Tuy nhiên, trong các sự cố hoả hoạn, nhiệt độ ngọn lửa cao tiềm ẩn nguy cơ bùng phát đám cháy mạnh và gây ra thiệt hại lớn về người và tài sản.

Hình 6.1. *Đèn cồn dùng trong phòng thí nghiệm có nhiệt độ ngọn lửa cao.*

Ví dụ: Nhiệt độ ngọn lửa theo lí thuyết khi đốt cháy ethylic alcohol đạt tới 2 082 °C.

Bảng 6.2. *Nhiệt độ ngọn lửa của một số nhiên liệu trong không khí ở áp suất 1 atm(*)*

Nhiên liệu	Nhiệt độ ngọn lửa, K	Nhiên liệu	Nhiệt độ ngọn lửa, K
Carbon monoxide	2 400	Acetylene	2 600
Hydrogen	2 400	Propane	2 260
Methane	2 220	Benzene	2 370
Than đá	2 200	Dầu đốt	2 300

Nhiệt độ ngọn lửa khi đốt cháy nhiên liệu trong oxygen tinh khiết cao hơn khi đốt cháy trong không khí. Ví dụ, đèn xì oxygen-acetylene dùng trong hàn cắt kim loại do tạo ra được nhiệt độ ngọn lửa đạt đến 3 410 K.

EM CÓ BIẾT

Xác định điểm chớp cháy của nhiên liệu theo Tiêu chuẩn Việt Nam TCVN 7498:2005

Đổ mẫu nhiên liệu vào cốc thử sao cho đỉnh tâm mẫu nằm đúng vào vạch dấu, đặt cốc thử vào giữa tâm bếp đun.

Với thiết bị thủ công, ban đầu điều chỉnh tốc độ gia nhiệt sao cho nhiệt độ hiển thị trên dụng cụ đo từ 14 °C/phút đến 17 °C/phút. Khi nhiệt độ của mẫu thử đạt đến nhiệt độ thấp hơn điểm chớp cháy dự kiến khoảng 56 °C, điều chỉnh tốc độ gia nhiệt để đạt 5 °C/phút đến 6 °C/phút trong khoảng 28 °C cuối cùng trước khi đến điểm chớp cháy.

Đốt ngọn lửa thử bằng khí thiên nhiên (methane) hoặc gas đóng chai (butane, propane) và điều chỉnh để ngọn lửa có đường kính từ 3,2 mm đến 4,8 mm.

Ngọn lửa thử được đưa ngang qua cốc tại các khoảng thời gian xác định. Điểm chớp cháy là nhiệt độ thấp nhất của nhiên liệu, tại đó khi đưa ngọn lửa thử vào làm cho pha hơi của mẫu bùng cháy.

Hình 6.2. *Thiết bị cốc hở Cleveland*

4. a) Tại sao phản ứng đốt cháy các nhiên liệu thường có nhiệt độ ngọn lửa cao? Điều này có ý nghĩa gì trong đời sống và sản xuất?

b) Tại sao nhiệt độ ngọn lửa khi đốt cháy một chất trong oxygen tinh khiết cao hơn khi đốt cháy trong không khí?

(*) *Nguồn: F.A. Williams, Encyclopedia of Physical Science and Technology (Third Edition), 2003.*

NHIỆT ĐỘ TỰ BỐC CHÁY

1. Khái niệm

Nhiệt độ tự bốc cháy (autoignition temperature) là nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển, tại đó chất cháy tự cháy trong không khí mà không cần tiếp xúc với nguồn lửa.

Bảng 6.3. *Nhiệt độ tự bốc cháy của một số chất(*)*

Nhiên liệu	Nhiệt độ tự bốc cháy (°C)	Nhiên liệu	Nhiệt độ tự bốc cháy (°C)
Carbon monoxide	605	Propane	470
Hydrogen	560	Pentane	285
Methane	610	Octane	210
Ethane	525	Benzene	555

2. Đặc điểm

Nhiệt độ tự bốc cháy càng thấp thì khả năng gây cháy, nổ càng cao. Do vậy, khi bảo quản cần để bình chứa chất cháy xa nguồn truyền nhiệt, kho chứa thông thoáng, khi vận chuyển cần tránh va đập, cọ sát.

5. Một số vụ nổ xe bồn chở xăng, dầu xảy ra khi thợ sửa chữa đang hàn xì nắp bồn.

a) Hãy chỉ ra 3 yếu tố gây nổ dù bồn đã được tháo hết nhiên liệu lỏng.

b) Nếu trong quá trình hàn xì, nắp bồn vẫn đóng thì vụ nổ gây ra bởi hỗn hợp hơi trong bồn đã đạt điểm chớp cháy hay đã đạt nhiệt độ tự bốc cháy?

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

EM ĐÃ HỌC

- Điểm chớp cháy là nhiệt độ thấp nhất tại áp suất khí quyển mà chất cháy bốc cháy trong không khí khi gặp nguồn lửa.
- Nhiệt độ ngọn lửa là nhiệt độ cao nhất tạo ra bởi phản ứng đốt cháy nhiên liệu ở áp suất khí quyển.
- Nhiệt độ tự bốc cháy là nhiệt độ thấp nhất mà tại đó, chất cháy tự cháy trong không khí mà không cần tiếp xúc với nguồn lửa.

EM CÓ THỂ

- Phân loại được chất lỏng dễ cháy và chất lỏng có thể gây cháy dựa vào điểm chớp cháy.
- Đánh giá nguy cơ gây cháy, nổ của các vật liệu, nhiên liệu phổ biến.

(*) *Nguồn: M. Huth, A. Heilos. (2013). Fuel flexibility in gas turbine systems: impact on burner design and performance. Woodhead Publishing.*

BÀI 7

HOÁ HỌC VỀ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

MỤC TIÊU

- Tính được $\Delta_r H^o$ một số phản ứng cháy, nổ để dự đoán mức độ mãnh liệt của phản ứng cháy, nổ.
- Tính được sự thay đổi của tốc độ phản ứng cháy, "tốc độ phản ứng hô hấp" theo giả định về sự phụ thuộc vào nồng độ oxygen.

Phản ứng cháy, nổ được đặc trưng bởi hiệu ứng toả nhiệt mạnh, tốc độ phản ứng nhanh, phản ứng trước cung cấp nhiệt cho phản ứng sau và xảy ra nối tiếp. Vậy, hiệu ứng nhiệt của phản ứng đốt cháy một số nhiên liệu phổ biến được xác định như thế nào và giá trị thu được có ý nghĩa gì?

I BIẾN THIÊN ENTHALPY CỦA MỘT SỐ PHẢN ỨNG CHÁY, NỔ

Việc xác định được biến thiên enthalpy của phản ứng cháy, nổ giúp sử dụng nhiên liệu tiết kiệm, an toàn và phòng tránh sự cố hoả hoạn.

Phần dưới đây trình bày cách tính biến thiên enthalpy $\Delta_r H^o_{298}$ của một số phản ứng đốt cháy nhiên liệu phổ biến thông qua nhiệt tạo thành $\Delta_f H^o_{298}$ hoặc năng lượng liên kết (E_b).

1. Đốt cháy than đá

Than đá được mệnh danh là "vàng đen" và được sử dụng làm nhiên liệu ở nhiều nhà máy nhiệt điện, ở các cơ sở sản xuất và hộ gia đình nước ta.

Phản ứng đốt cháy carbon trong than đá: $C(s) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$

Biến thiên enthalpy ($\Delta_r H^o_{298}$) của phản ứng được tính thông qua các giá trị nhiệt tạo thành:

Chất	C(s)	$O_2(g)$	$CO_2(g)$
$\Delta_f H^o_{298}$ (kJ/mol)	0	0	–394

$$\Delta_r H^o_{298} = \sum \Delta_f H^o_{298}\,(sp) - \sum \Delta_f H^o_{298}\,(cđ) = -394 - (0+0) = -394\ (kJ)$$

2. Đốt cháy khí thiên nhiên

Khí thiên nhiên (thành phần chính là methane) được dùng làm nhiên liệu ở nhà máy nhiệt điện khí và cung cấp chất đốt ở nhiều hộ gia đình vùng ôn đới.

Khí thiên nhiên được vận chuyển trong các đường ống dẫn khí và gây nguy cơ cháy nổ khi bị rò rỉ. Đặc biệt, methane gây ra một số vụ nổ lớn ở mỏ than khi gặp nguồn lửa.

Phản ứng đốt cháy methane:

$$CH_4(g) + 2O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g) + 2H_2O(g)$$

Biến thiên enthalpy chuẩn $\Delta_rH^o_{298}$ của phản ứng được tính thông qua các giá trị năng lượng liên kết (E_b):

Liên kết	C—H	O=O	C=O	O—H
E_b (kJ/mol)	418	494	732	459

$$\Delta_rH^o_{298}(\text{methane}) = \sum E_b(\text{cđ}) - \sum E_b(\text{sp}) = (418 \cdot 4 + 494 \cdot 2) - (732 \cdot 2 + 459 \cdot 4)$$
$$= -640 \text{ (kJ)}$$

Khí thiên nhiên hiện nay còn được nén ở áp suất cao (compressed natural gas – CNG) để tiện bảo quản và sử dụng làm nhiên liệu cho phương tiện giao thông.

3. Đốt cháy gas

Gas được dùng khá phổ biến làm nhiên liệu đun nấu ở nhiều gia đình, có thành phần chính là propane (C_3H_8) và butane (C_4H_{10}). Ở 25 °C, gas tồn tại ở thể khí. Tuy nhiên, gas được hoá lỏng để tiện lợi khi bảo quản, vận chuyển và sử dụng.

Ví dụ: Đốt cháy một loại gas chứa propane và butane với tỉ lệ số mol tương ứng là 2 : 3.

$$C_3H_8(g) + 5O_2(g) \xrightarrow{t^o} 3CO_2(g) + 4H_2O(g) \qquad \Delta_rH^o_{298} \text{ (propan)}$$

$$C_4H_{10}(g) + \frac{13}{2}O_2(g) \xrightarrow{t^o} 4CO_2(g) + 5H_2O(g) \qquad \Delta_rH^o_{298}\text{(butane)}$$

Biến thiên enthalpy chuẩn $\Delta_rH^o_{298}$ của phản ứng đốt cháy 1 mol gas được tính thông qua các giá trị năng lượng liên kết:

Liên kết	C—H	C—C	O=O	C=O	O—H
E_b (kJ/mol)	418	346	494	732	459

$\Delta_rH^o_{298}(\text{propane}) = (418 \cdot 8 + 346 \cdot 2 + 494 \cdot 5) - (732 \cdot 6 + 459 \cdot 8) = -1\,558$ (kJ)

$\Delta_rH^o_{298}(\text{butane}) = (418 \cdot 10 + 346 \cdot 3 + 494 \cdot 6{,}5) - (732 \cdot 8 + 459 \cdot 10) = -2\,017$ (kJ)

Biến thiên enthalpy chuẩn của phản ứng đốt cháy gas:

$\Delta_rH^o_{298}(\text{gas}) = 0{,}4 \cdot \Delta_rH^o_{298}(\text{propane}) + 0{,}6 \cdot \Delta_rH^o_{298}(\text{butane}) = -1\,833{,}4$ (kJ).

Như vậy, nhiệt lượng giải phóng ra khi đốt cháy 1 mol gas trên cao gấp gần 3 lần so với đốt cháy 1 mol methane.

4. Đốt cháy xăng

Xăng là hỗn hợp các hydrocarbon no có chứa từ 7 đến 12 nguyên tử carbon. Xăng được sử dụng làm nhiên liệu cho nhiều loại phương tiện có động cơ đốt trong như ô tô, xe máy.

Ví dụ: Phản ứng đốt cháy octane, chất có nhiều trong xăng.

$$C_8H_{18}(g) + \frac{25}{2}O_2(g) \xrightarrow{t^o} 8CO_2(g) + 9H_2O(g)$$

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Biến thiên enthalpy chuẩn $\Delta_r H^o_{298}$ của phản ứng được tính thông qua các giá trị năng lượng liên kết:

Liên kết	C—H	C—C	O=O	C=O	O—H
E_b (kJ/mol)	418	346	494	732	459

$\Delta_r H^o_{298}(\text{octane}) = (418 \cdot 18 + 346 \cdot 7 + 494 \cdot 12{,}5) - (732 \cdot 16 + 459 \cdot 18) = -3\,853$ (kJ).

Phản ứng đốt cháy xăng toả ra nhiệt lượng lớn. Xăng là loại nhiên liệu phổ biến, kinh tế nhưng cũng tiềm ẩn nhiều nguy cơ gây hoả hoạn.

5. Đốt cháy cồn

Cồn (ethanol) hiện được dùng để sản xuất xăng sinh học E5 (chứa 5% thể tích ethanol). Ngoài ra, cồn còn được dùng làm nhiên liệu cho đèn cồn, làm chất đốt để nướng thực phẩm ở nhiều gia đình.

Phản ứng đốt cháy ethanol:

$$C_2H_5OH(l) + 3O_2(g) \xrightarrow{t^o} 2CO_2(g) + 3H_2O(g)$$

Biến thiên enthalpy chuẩn $\Delta_r H^o_{298}$ của phản ứng được tính thông qua các giá trị nhiệt tạo thành chuẩn:

Chất	$C_2H_5OH(l)$	$O_2(g)$	$CO_2(g)$	$3H_2O(g)$
$\Delta_f H^o_{298}$ (kJ/mol)	–276	0	–394	–242

$\Delta_r H^o_{298}(\text{ethanol}) = -394 \cdot 2 - 242 \cdot 3 - (-276 + 0) = -1\,238$ (kJ)

Phản ứng đốt cháy cồn toả rất nhiều nhiệt, do vậy cần hết sức cẩn thận khi bảo quản, vận chuyển và sử dụng cồn, để phòng nguy cơ gây bỏng.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

1. Xét phản ứng: $CH_4(g) + 2O_2(g) \longrightarrow CO_2(g) + 2H_2O(g)$ $\quad \Delta_r H^o_{298} = -802$ kJ

   Tính $\Delta_f H^o_{298}$ của $CH_4(g)$, biết $\Delta_f H^o_{298}$ của $CO_2(g)$ và $H_2O(g)$ lần lượt là – 394 kJ/mol và –242 kJ/mol.

2. Tính nhiệt lượng toả ra khi đốt cháy 1 kg một loại củi khô, biết củi khô chứa 54% khối lượng cellulose và phân tử cellulose được cấu tạo bởi các gốc glucose.

   Giả thiết toàn bộ nhiệt lượng toả ra được tính từ biến thiên enthalpy của phản ứng đốt cháy glucose:

   $$C_6H_{10}O_5(s) + 5O_2(g) \longrightarrow 6CO_2(g) + 5H_2O(l) \qquad \Delta_r H^o_{298} = -2\,880 \text{ kJ}$$

3. Ngày 04 tháng 8 năm 2020 đã xảy ra một vụ nổ kinh hoàng ở nhà kho tại cảng Beirut của Lebanon. Đây là nhà kho chứa khoảng 2 700 tấn NH_4NO_3, một loại hoá chất vừa được sử dụng làm phân bón, vừa được dùng làm thuốc nổ do có khả năng phân huỷ thành khí và hơi, kèm theo toả nhiệt mạnh: $2NH_4NO_3(s) \xrightarrow{t^o} 2N_2(g) + O_2(g) + 4H_2O(g)$

a) Tính $\Delta_r H^o_{298}$ của phản ứng, biết $\Delta_f H^o_{298}$ của $NH_4NO_3(s)$ và $\Delta_f H^o_{298}$ của $H_2O(g)$ lần lượt là –365,6 kJ/mol và –242 kJ/mol.

b) Tính nhiệt lượng tối đa giải phóng ra từ vụ nổ khi toàn bộ lượng NH_4NO_3 bị phân huỷ.

II TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG CHÁY VÀ TỐC ĐỘ "PHẢN ỨNG HÔ HẤP"

1. Phản ứng đốt cháy

Xét phản ứng đốt cháy than đá trong không khí: $C(s) + O_2(g) \xrightarrow{t^o} CO_2(g)$.

Giả thiết tốc độ phản ứng phụ thuộc nồng độ oxygen trong không khí theo phương trình:

$$v = k \cdot C_{O_2}$$

Ở điều kiện thường, oxygen chiếm 21% thể tích không khí và có áp suất là 0,21 atm.

Khi phần trăm thể tích oxygen trong không khí giảm từ 21% xuống 14% thì tốc độ phản ứng cháy sẽ giảm. Do nồng độ oxygen tỉ lệ thuận với phần trăm thể tích oxygen trong khí quyển nên tốc độ phản ứng cháy giảm so với điều kiện bình thường là:

$$\frac{v_{(21\%O_2)}}{v_{(14\%O_2)}} = \frac{k \cdot C_{(21\%O_2)}}{k \cdot C_{(14\%O_2)}} = \frac{k \cdot \%V_{(21\%O_2)}}{k \cdot \%V_{(14\%O_2)}} = \frac{21}{14} = 1{,}5 \text{ (lần)}.$$

Như vậy, khi nồng độ oxygen giảm thì tốc độ phản ứng cháy giảm và nguyên tắc này được ứng dụng rộng rãi để dập tắt đám cháy.

2. "Phản ứng hô hấp"

Quá trình hô hấp cung cấp oxygen cho sự sống của các loài sinh vật. Đối với con người, việc hít thở không khí trong lành, giàu oxygen là yếu tố đặc biệt quan trọng giúp cho cơ thể khoẻ mạnh.

Xét "phản ứng hô hấp":

$$O_2 \text{ (không khí)} \longrightarrow O_2 \text{ (cơ thể)}$$

Giả thiết tốc độ "phản ứng hô hấp" phụ thuộc nồng độ oxygen trong không khí theo phương trình: $v = k \cdot C_{O_2}$.

Ví dụ 1: Trong một phòng ngủ nhỏ và kín, phần trăm thể tích oxygen trong không khí lúc gần sáng giảm còn 18%.

Tốc độ "phản ứng hô hấp" giảm so với điều kiện bình thường là:

$$\frac{v_{(21\%O_2)}}{v_{(14\%O_2)}} = \frac{k \cdot C_{(21\%O_2)}}{k \cdot C_{(18\%O_2)}} = \frac{k \cdot \%V_{(21\%O_2)}}{k \cdot \%V_{(18\%O_2)}} = \frac{21}{18} = 1{,}17 \text{ (lần)}.$$

Ví dụ 2: Một bệnh nhân được điều trị trong buồng oxygen cao áp ở 25 °C với áp suất khí O_2 là 2,52 atm.

Do nồng độ oxygen tỉ lệ thuận với áp suất nên tốc độ "phản ứng hô hấp" tăng so với điều kiện bình thường là:

$$\frac{v_{(P_{O_2}=2{,}52\text{atm})}}{v_{(P_{O_2}=0{,}21\text{atm})}} = \frac{k \cdot C_{(P_{O_2}=2{,}52\text{atm})}}{k \cdot C_{(P_{O_2}=0{,}21\text{atm})}} = \frac{k \cdot P_{(P_{O_2}=2{,}52\text{atm})}}{k \cdot P_{(P_{O_2}=0{,}21\text{atm})}} = \frac{2{,}52}{0{,}21} = 12 \text{ (lần)}.$$

Con người thường bị thiếu oxygen khi ở lâu trong không gian kín, chật hẹp, ở trên cao, nơi tập trung đông người, nơi có nhiều khí thải, nơi diễn ra sự cháy,... Việc giảm lượng oxygen sẽ ảnh hưởng đến tốc độ "phản ứng hô hấp" và tác động trực tiếp tới sức khoẻ.

Bảng 7.1. *Ảnh hưởng của hàm lượng oxygen trong không khí tới sức khoẻ*

Phần trăm thể tích oxygen	Ảnh hưởng
18%	Bắt đầu có cảm giác ngột ngạt
16%	Tăng hô hấp, tăng nhịp tim, đau đầu, buồn nôn
12%	Chóng mặt, mất thăng bằng
10%	Sắc mặt xanh xao, bất tỉnh, ói mửa
8%	Bất tỉnh, hôn mê

4. Một người ngủ quên trong ô tô tắt máy, đóng kín cửa. Sau một thời gian, khi phần trăm thể tích oxygen giảm xuống còn 16% thì rất may có người kịp thời phát hiện, phá vỡ kính xe để đưa đi cấp cứu.
   Hỏi tại thời điểm có người đến cứu, tốc độ "phản ứng hô hấp" của người trong xe giảm bao nhiêu lần so với bình thường? Giả thiết $v_{hô\ hấp} = k \cdot C_{O_2}$.
5. Đỉnh Fansipan (có độ cao 3 147 m so với mực nước biển) là ngọn núi cao nhất Việt Nam. Giả thiết không khí trên đỉnh Fansipan có áp suất 0,66 atm và chứa 21% thể tích oxygen.
   Hỏi tốc độ "phản ứng hô hấp" giảm bao nhiêu lần so với điều kiện bình thường? Giả thiết $v_{hô\ hấp} = k \cdot C_{O_2}$.

EM ĐÃ HỌC

- Phản ứng cháy, nổ kèm theo sự giải phóng năng lượng lớn và tốc độ phản ứng nhanh.
- Nồng độ oxygen ảnh hưởng trực tiếp đến tốc độ phản ứng cháy, nổ và "phản ứng hô hấp" ở sinh vật.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

EM CÓ THỂ

- Tính được hiệu ứng nhiệt của phản ứng cháy, nổ từ các giá trị năng lượng liên kết hoặc nhiệt hình thành, dự đoán được mức độ mãnh liệt của các phản ứng đó.
- Duy trì không gian thông thoáng để đảm bảo lượng oxygen cho cơ thể.

BÀI 8

PHÒNG CHỐNG CHÁY, NỔ

MỤC TIÊU

- Phân tích được dấu hiệu để nhận biết về những nguy cơ và cách giảm nguy cơ gây cháy, nổ; cách xử lí khi có cháy, nổ.
- Nêu được các nguyên tắc chữa cháy dựa vào các yếu tố ảnh hưởng đến tốc độ phản ứng hoá học.
- Giải thích được vì sao thường dùng carbon dioxide, dùng nước để chữa cháy, nhưng trong một số trường hợp không được dùng nước để chữa cháy mà lại phải dùng cát, carbon dioxide,...
- Giải thích được tại sao đám cháy có mặt các kim loại hoạt động mạnh như kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm,... không sử dụng nước, carbon dioxide, cát, bọt chữa cháy để dập tắt đám cháy.

Thực tế cho thấy, phần lớn các vụ cháy, nổ nếu được phát hiện sớm và xử lí kịp thời, đúng quy trình thì hậu quả của chúng sẽ giảm đi nhiều lần.

Vậy, dựa vào dấu hiệu nào để sớm nhận ra nguy cơ xảy ra đám cháy? Khi chữa cháy cần tuân theo các quy tắc và quy trình nào? Sử dụng chất chữa cháy nào để dập tắt đám cháy đó?

1 PHÒNG CHÁY, NỔ

1. Nguy cơ gây cháy, nổ

Điều kiện cần và đủ để xuất hiện cháy, nổ là có đủ ba yếu tố: nguồn nhiệt, chất cháy và chất oxi hoá.

Hình 8.1. *Cháy có thể xảy ra do chập điện*

Bảng 8.1. *Các nguồn phát sinh cháy, nổ phổ biến*

NGUỒN PHÁT SINH NHIỆT	
Nguồn lửa	– Vứt que diêm cháy dở, tàn lửa vào chất gây cháy. – Bật lửa ở nơi có chất dễ cháy như xăng dầu, hơi cồn, hơi gas, khí methane. – Thắp đèn, đốt hương, vàng mã ở gần các vật dụng dễ bắt lửa. – Hàn cắt kim loại để bắn tia lửa điện vào vật liệu dễ cháy hoặc nung nóng nhiên liệu tới điểm tự bốc cháy. – Tia sét.
Bức xạ nhiệt	Ánh nắng mặt trời hội tụ đủ sức nóng tạo thành nguồn nhiệt.
Ma sát tĩnh điện	Các vật thể chất cháy cọ xát với nhau.
Đun bếp	Để bén lửa sang vật dễ cháy. Đun quá nóng khiến dầu mỡ bắt lửa.
Thiết bị điện	– Sử dụng bàn là, bếp điện, máy sấy,… nhưng quên tắt thiết bị. – Sử dụng thiết bị điện quá tải, chất cách điện bị hư hỏng, các thiết bị có nhiệt độ cao như lò đốt, lò nung không an toàn. – Tia lửa điện khi đóng cầu dao điện, cháy cầu chì, chập mạch điện. – Tự ý nâng cấp, đấu nối các thiết bị điện của ô tô, xe máy không đúng kĩ thuật gây cháy xe.
NGUỒN PHÁT SINH CHẤT CHÁY	
Nhiên liệu	– Rò rỉ nhiên liệu từ các đường ống dẫn khí, các bể chứa nhiên liệu, rò rỉ gas từ bình gas. – Chiết, vận chuyển gas, xăng, dầu trái phép. – Tích trữ trái phép các chất dễ gây cháy nổ như xăng, dầu, cồn đốt, khí đốt.
Vật liệu, hoá chất	– Sắp xếp hàng hoá, vật dụng dễ cháy gần nguồn nhiệt. – Ngòi nổ, dây dẫn từ các hoá chất dễ cháy như phosphorus, sulfur.
NGUỒN PHÁT SINH CHẤT OXI HOÁ	
Hoá chất, thuốc nổ	– Để rơi vãi các chất oxi hoá như chromium(VI) oxide, potassium nitrate vào chất dễ cháy. – Thuốc nổ, thuốc pháo từ các hoá chất gây cháy như potassium nitrate.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

2. Các biện pháp cơ bản phòng cháy, nổ

Để đề phòng nguy cơ gây cháy, nổ cần kiểm soát chặt chẽ các nguồn nhiệt, chất cháy, chất oxi hoá.

Bảng 8.2. *Kiểm soát các nguồn phát sinh gây cháy nổ*

KIỂM SOÁT NGUỒN PHÁT SINH NHIỆT	
Nguồn lửa	Loại trừ mọi khả năng phát sinh ra nguồn lửa tại nơi có các chất dễ cháy nổ như: – Tẩm ướt que diêm, tàn thuốc trước khi vứt vào thùng rác; đổ nước vào khu vực lửa trại ngay khi kết thúc. – Không bật lửa ở nơi có chất dễ cháy, không đốt lửa trong rừng, không đốt rác bừa bãi. – Để các vật dụng dễ bắt lửa xa nơi thắp đèn, đốt hương, vàng mã; để bình gas cách xa bếp lửa và có tường bảo vệ. – Che chắn cẩn thận khi hàn, cắt kim loại. – Có cột chống sét đúng quy định. – Không khoan, cắt, đốt nóng các vật nghi là đầu đạn, bom, mìn, bình khí nén, bồn chứa xăng dầu.
Bức xạ nhiệt	Nơi bảo quản, tích trữ nguyên vật liệu dễ cháy phải thông thoáng, tránh tiếp xúc ánh sáng trực tiếp.
Ma sát tĩnh điện	Sắp xếp các chất dễ cháy đúng quy định, đảm bảo cách điện, cách nhiệt, chống va đập, cọ xát.
Đun bếp	Tập trung khi nấu nướng để tránh quên tắt thiết bị hoặc để thiết bị quá nóng gây cháy.
Thiết bị điện	– Tắt bàn là, bếp điện, máy sấy sau khi sử dụng và để cách xa các vật liệu dễ cháy. – Sử dụng thiết bị điện đúng công suất, cầu dao điện đảm bảo tiếp xúc điện tốt, có sự giám sát khi sử dụng các thiết bị có nhiệt độ cao như lò đốt, lò nung. – Giữ nguyên các thiết bị điện ô tô, xe máy theo đúng thiết kế của nhà sản xuất.
KIỂM SOÁT NGUỒN PHÁT SINH CHẤT CHÁY	
Nhiên liệu	– Khoá bình gas sau khi sử dụng, hạn chế sử dụng bình gas mini. – Tuân thủ quy trình và quy tắc an toàn khi được phép chiết, vận chuyển gas, xăng dầu. – Không lưu trữ nhiều xăng, dầu, cồn đốt, bình khí nén trong nhà và gần khu dân cư.
Vật liệu, hoá chất	– Sắp xếp hàng hoá, vật dùng dễ cháy cách xa nguồn lửa, nguồn nhiệt. – Không chế tạo trái phép ngòi nổ, dây dẫn cháy, bom xăng, vật liệu nổ.
KIỂM SOÁT NGUỒN PHÁT SINH CHẤT OXI HOÁ	
Hoá chất, thuốc nổ	– Cách li chất cháy và chất oxi hoá khi chưa cần sử dụng, các vật chứa phải riêng biệt và để cách xa nguồn nhiệt. – Không tàng trữ, chế tạo trái phép thuốc nổ, thuốc pháo. – Ngăn cách chất cháy và chất oxi hoá khi chưa đưa vào quá trình sản xuất.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Cần chuẩn bị sẵn sàng các phương tiện, nhân lực và không gian để phòng bị khi xảy ra sự cố cháy, nổ.

- *Phương tiện để phòng chống cháy nổ*: bình chữa cháy, cát, nguồn nước, vòi nước, thiết bị báo cháy, các dụng cụ để giúp thoát hiểm như búa, xà beng, thang dây, thang hạ chậm, mặt nạ phòng độc.
- *Nhân lực*: hướng dẫn các kĩ năng cơ bản để xử lí khi có cháy nổ như cách sử dụng các phương tiện phòng cháy, chữa cháy, chuẩn bị sẵn các phương án phòng cháy, chữa cháy.
- *Không gian*: đủ không gian để thoát nạn, sơ tán người, tài sản và lối di chuyển của phương tiện chữa cháy, có lối thoát nạn dự phòng.

1. Nêu các biện pháp đề phòng nguy cơ cháy nổ từ các thiết bị điện trong gia đình.
2. Nêu các biện pháp đề phòng cháy, nổ khi sử dụng bếp gas và cách xử lí sự cố khi phát hiện rò rỉ gas trong nhà.

II CHỮA CHÁY

1. Các dấu hiệu để nhận biết đám cháy

Hoả hoạn thường gây ra các thiệt hại nghiêm trọng về người và tài sản nếu không được phát hiện và ngăn chặn kịp thời. Do đó, cần sớm nhận biết hoả hoạn để xử lí kịp thời, hạn chế tối đa thiệt hại.

Hình 8.2. *Cháy nhà thờ Đức Bà Pa-ri năm 2019*

Thông thường, có ba dấu hiệu phổ biến để nhận biết một đám cháy đang xảy ra, đó là mùi, khói, ánh lửa và tiếng nổ được tạo ra từ đám cháy.

- *Mùi sản phẩm cháy*

Đám cháy có thể xuất phát từ nguyên nhân khác nhau và đốt cháy các chất khác nhau. Các chất khi cháy sinh ra mùi, thường gọi chung là mùi khét. Mùi này rất đặc trưng và rất dễ nhận biết, nhất là ở khoảng cách gần.

- *Khói từ đám cháy*

  Khói là một sản phẩm của sự cháy và có màu sắc khác nhau, phụ thuộc vào chất cháy và điều kiện cháy đủ hay thiếu không khí. Thông thường các vụ hoả hoạn có khói màu đen hoặc màu xám. Quy mô đám cháy càng lớn thì lượng khói sinh ra càng nhiều, cột khói bốc lên càng cao. Khói trong đám cháy chứa nhiều khí độc nên có khả năng gây ngộ độc cao.

- *Ngọn lửa, tiếng nổ*

  Dấu hiệu đặc trưng của phản ứng cháy là ngọn lửa và tiếng nổ. Trong các đám cháy như cháy trạm biến áp, cháy bình gas thì tiếng nổ và ngọn lửa lớn hơn.

  Ngoài những dấu hiệu trên, chúng ta có thể nhận hoặc phát tín hiệu cảnh báo sớm về đám cháy nhờ thiết bị báo cháy, tiếng ồn (tiếng la hét, còi báo động,...).

  Từ các dấu hiệu của đám cháy, chúng ta có thể sớm phát hiện được đám cháy, phán đoán được chất cháy, quy mô cháy để có biện pháp chữa cháy phù hợp và đạt hiệu quả cao.

Bảng 8.3. *Phân loại đám cháy theo chất cháy (TCVN 4878 : 2009)*

Loại đám cháy	Vật liệu bị cháy
Loại A	Chất rắn bao gồm gỗ, giấy, vải, rác và vật liệu thông thường khác.
Loại B	Chất lỏng dễ cháy như xăng, dầu, sơn,...
Loại C	Các thiết bị điện và các đám cháy liên quan tới điện.
Loại D	Kim loại và hợp kim dễ cháy.
Loại E	Dầu, mỡ trong các dụng cụ nấu nướng.

2. Nguyên tắc chữa cháy

Một đám cháy có thể được ngăn ngừa hoặc dập tắt bằng cách loại bỏ hoặc làm suy yếu bất kì yếu tố nào trong tam giác cháy (chất cháy, chất oxi hoá, nguồn nhiệt).

Ví dụ: Để dập tắt đám cháy có thể dùng cát, khí carbon dioxide phủ lên đám cháy để chặn nguồn cung cấp oxygen, dùng nước để hạ nhiệt độ của nhiên liệu xuống dưới nhiệt độ ngọn lửa hoặc tách nhiên liệu ra khỏi đám cháy.

3. Cách xử lí sự cố cháy, nổ

Khi xảy ra hoả hoạn, cần xử lí kịp thời và đúng quy trình, tuân theo các bước được hướng dẫn trong tiêu lệnh chữa cháy để hạn chế tối đa những thiệt hại có thể gây ra.

Hình 8.3. *Tiêu lệnh chữa cháy do Cục cảnh sát phòng cháy, chữa cháy ban hành*

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

(1) Báo động cho mọi người biết

Người phát hiện đám cháy có thể hô hoán, gõ kẻng, gọi loa, bấm chuông báo cháy,… nhằm báo động cho mọi người trong khu vực biết để cùng dập tắt đám cháy hoặc cùng chạy đến nơi an toàn khi thấy đám cháy đã lan rộng.

(2) Cúp cầu dao điện khu vực bị cháy

Cắt điện ở khu vực cháy để tránh nguy cơ chập mạch, nổ điện khiến lửa càng lớn hơn và đảm bảo sức khoẻ, tính mạng cho con người.

Lưu ý: Nên dùng bao tay hoặc vật cách điện để cắt cầu dao, tránh nguy cơ bị điện giật.

(3) Dùng vật dụng tại chỗ để dập lửa

Sử dụng ngay các vật dụng có sẵn như bình chữa cháy, chăn, nước và vật dụng chứa nước, cát,... để dập lửa.

(4) Gọi 114 để gọi đội phòng cháy chữa cháy (PCCC) chuyên nghiệp

Nếu nhận thấy đám cháy có nguy cơ lan rộng ngoài tầm kiểm soát của lực lượng chữa cháy tại chỗ thì cần thoát ra bên ngoài và gọi điện cho lực lượng PCCC theo số 114 để thông báo cụ thể, rõ ràng địa điểm, loại công trình đang cháy (nhà chung cư, nhà kho, cơ sở sản xuất,…), sơ bộ về quy mô và số người mắc kẹt bên trong nếu có.

Trong khi chờ lực lượng PCCC chuyên nghiệp, lực lượng chữa cháy tại chỗ cần triển khai:

- Hướng dẫn và hỗ trợ mọi người thoát khỏi khu vực cháy một cách trật tự, sơ tán tài sản đến nơi an toàn, cách li các vật liệu dễ cháy ra khỏi đám cháy.
- Mở đường cho xe chữa cháy tiếp cận hiện trường, thiết lập vành đai an toàn, cung cấp thông tin và phối hợp với lực lượng PCCC để chữa cháy kịp thời.
- Sơ cứu người bị nạn (gọi xe cứu thương theo số 115), bảo vệ vòng ngoài đề phòng kẻ gian lợi dụng vào trộm cắp tài sản.

4. Các chất chữa cháy thông dụng

Chất chữa cháy là chất có khả năng làm giảm tốc độ phản ứng cháy và dập tắt được đám cháy. Hiện nay có nhiều loại chất chữa cháy, phổ biến là nước, carbon dioxide, bọt chữa cháy và bột chữa cháy.

Tuỳ vào đặc điểm của chất cháy mà sử dụng chất chữa cháy phù hợp.

Các thông tin cơ bản của các dạng chất chữa cháy thường gặp như sau:

- *Dạng lỏng: nước*

Đặc điểm	Phổ biến, sẵn có, dễ sử dụng, có khả năng dập tắt nhiều đám cháy thông thường.
Cách dùng	Phun trực tiếp lên đám cháy, phun làm mát xung quanh đám cháy để ngăn chặn đám cháy lan rộng.
Nguyên lí	Có tác dụng làm mát, hấp thụ nhiệt, làm giảm nhiệt độ xuống dưới nhiệt độ ngọn lửa, hơi nước sinh ra làm loãng nồng độ chất oxi hoá trong vùng cháy, làm giảm tốc độ phản ứng cháy.

Đối tượng	Chữa cháy cho các đám cháy loại A.
Cảnh báo	Không dùng cho đám cháy loại B, E (vì xăng, dầu, mỡ nổi trên nước nên sẽ làm đám cháy lan rộng), loại D (vì các kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm sẽ tiếp tục cháy do có phản ứng với nước). Phải ngắt hết nguồn điện trước khi dùng cho đám cháy loại C để tránh nguy cơ chập điện.

- *Dạng khí nén: carbon dioxide (CO_2)*

Đặc điểm	Có trong các bình chữa cháy loại nhỏ và vừa, cơ động, tiện dụng, hiệu quả, phổ biến, có khả năng dập tắt phần lớn các đám cháy.
Cách dùng	Phun trực tiếp lên đám cháy.
Nguyên lí	Cách li chất cháy với oxygen do khí CO_2 nặng hơn không khí, làm giảm nồng độ oxygen trong không khí xuống thấp hơn 14% để dập tắt đám cháy.
Đối tượng	Chữa cháy cho các đám cháy loại A, B, C, E.
Cảnh báo	Không dùng cho đám cháy kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm vì chúng sẽ tiếp tục cháy do có phản ứng với khí CO_2.

- *Dạng bọt: hỗn hợp không khí, nước và chất hoạt động bề mặt*

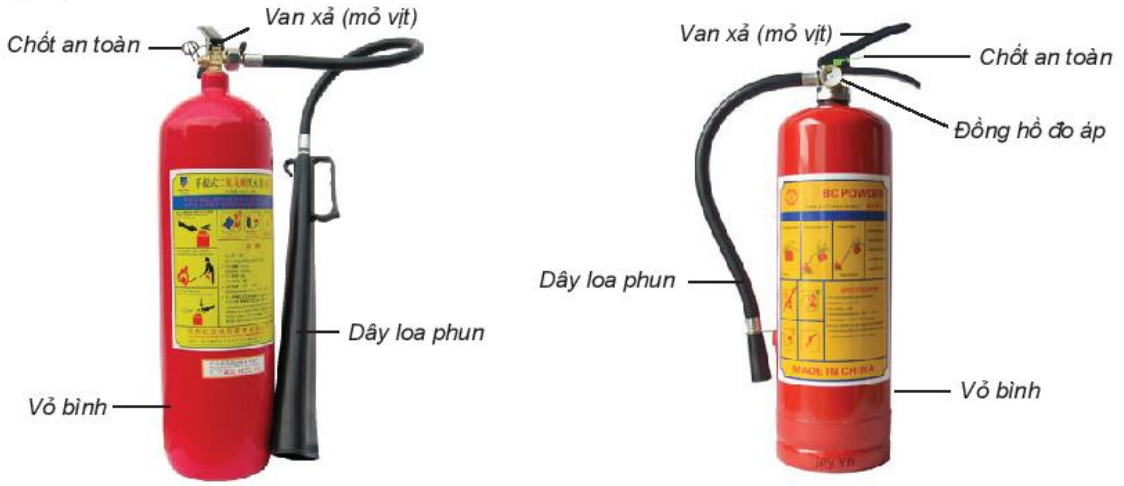
Đặc điểm	Tích trữ trong các bình chữa cháy nhỏ gọn, tiện lợi.
Cách dùng	Phun bọt trực tiếp phủ lên bề mặt.
Nguyên lí	Cách li chất cháy với oxygen do có lớp bọt bao phủ bề mặt chất cháy.
Đối tượng	Chữa cháy cho các đám cháy loại A, B, C, E.
Cảnh báo	Không dùng cho đám cháy kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm vì chúng sẽ tiếp tục cháy do có phản ứng với không khí và nước có trong bọt.

- *Dạng bột: $NaHCO_3$ (hàm lượng 80%) + khí đẩy (N_2, CO_2)*

Đặc điểm	Có trong các bình chữa cháy nhỏ gọn, tiện lợi, phổ biến.
Cách dùng	Phun trực tiếp lên bề mặt đám cháy.
Nguyên lí	Bột $NaHCO_3$ bị phân huỷ bởi nhiệt, sinh ra CO_2 và hơi H_2O làm giảm nồng độ O_2, ngăn chặn đám cháy.
Đối tượng	Phụ thuộc kí hiệu trên bình, ví dụ bột ABC (dùng để dập các đám cháy loại A, B, C).
Cảnh báo	Không dùng cho đám cháy kim loại kiềm, kiềm thổ và nhôm vì chúng sẽ tiếp tục cháy do có phản ứng với CO_2 và H_2O.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Hình 8.4 mô tả cấu tạo bình chữa cháy khí nén carbon dioxide và bình chữa cháy dạng bột.



a) Cấu tạo bình chữa cháy khí carbon dioxide

b) Cấu tạo bình chữa cháy dạng bột

Hình 8.4. *Cấu tạo bình chữa cháy*

3.

a) Hãy nêu các dấu hiệu nhằm phát hiện sớm đám cháy.

b) Em cần làm gì khi phát hiện đám cháy?

4. Để xử lí các đám cháy loại D như đám cháy kim loại magnesium không thể dùng nước, khí carbon dioxide, bọt chữa cháy, bột chữa cháy.

a) Viết các phương trình hoá học để giải thích lí do.

b) Đề xuất biện pháp dập tắt đám cháy magnesium.

EM ĐÃ HỌC

- Điều kiện cần và đủ để xuất hiện cháy nổ là có đủ ba yếu tố: nguồn nhiệt, chất cháy, chất oxi hoá.
- Dựa vào các dấu hiệu như cột khói, lửa cháy, mùi có thể nhận biết sớm đám cháy.
- Nguyên tắc chữa cháy là cách li chất cháy, cách li hoặc làm giảm ảnh hưởng của nhiệt độ, nồng độ oxygen.
- Giải thích được tại sao thường sử dụng nước và khí carbon dioxide để chữa cháy.

EM CÓ THỂ

- Cảnh báo sớm nguy cơ gây cháy và cách xử lí sự cố hoả hoạn theo tiêu lệnh chữa cháy.
- Tham gia vào các công việc của lực lượng chữa cháy tại chỗ.
- Sử dụng được một số loại bình chữa cháy thông dụng.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

CHUYÊN ĐỀ 3

THỰC HÀNH HOÁ HỌC VÀ CÔNG NGHỆ THÔNG TIN

BÀI 9

THỰC HÀNH VẼ CẤU TRÚC PHÂN TỬ

MỤC TIÊU

- Vẽ được công thức cấu tạo, công thức Lewis của một số chất vô cơ và hữu cơ.
- Lưu được các file, chèn được hình ảnh vào file Word, PowerPoint.

Hiện nay, có nhiều phần mềm máy tính để vẽ công thức cấu tạo và công thức Lewis của các chất. Cần thực hiện các bước như thế nào để vẽ được công thức của các chất và chèn được chúng vào file Word hoặc PowerPoint?

1 VẼ CÔNG THỨC CẤU TẠO VÀ CÔNG THỨC LEWIS

Để vẽ công thức cấu tạo và công thức Lewis của một chất, có thể sử dụng một số phần mềm có bản quyền hoặc phần mềm miễn phí tải về từ các trang chính thống của các tác giả hay các chủ sở hữu. Ví dụ: Chem3D trong gói phần mềm ChemOffice, HyperChem, Gaussview, Chemsketch, hay Avogadro,... Phần mềm Chemsketch(*) sẽ được giới thiệu mang tính chất ví dụ.

Phần mềm Chemsketch có thể được tải về và cài đặt như sau:

– Đi đến website https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php, tải về phần mềm ACD/ChemSketch miễn phí (Freeware version) cho người dùng cá nhân và cho mục đích giáo dục. Lưu thư mục phần mềm vào máy tính, ví dụ "D:/Phan mem/ACDLabs202111_ChemSketchFree_Install".

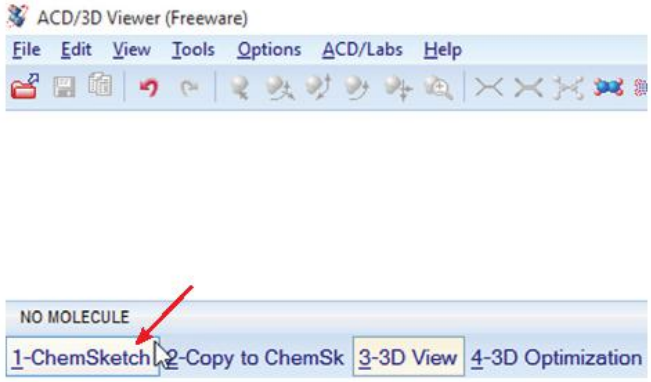
– Vào thư mục, nháy chuột vào file setup.exe để cài đặt phần mềm.

1. Vẽ công thức cấu tạo và công thức Lewis của chất

Hoạt động 1: Vẽ công thức cấu tạo của các chất ethane (C_2H_6), ethene (C_2H_4) và ethyne (C_2H_2).

Cách tiến hành:

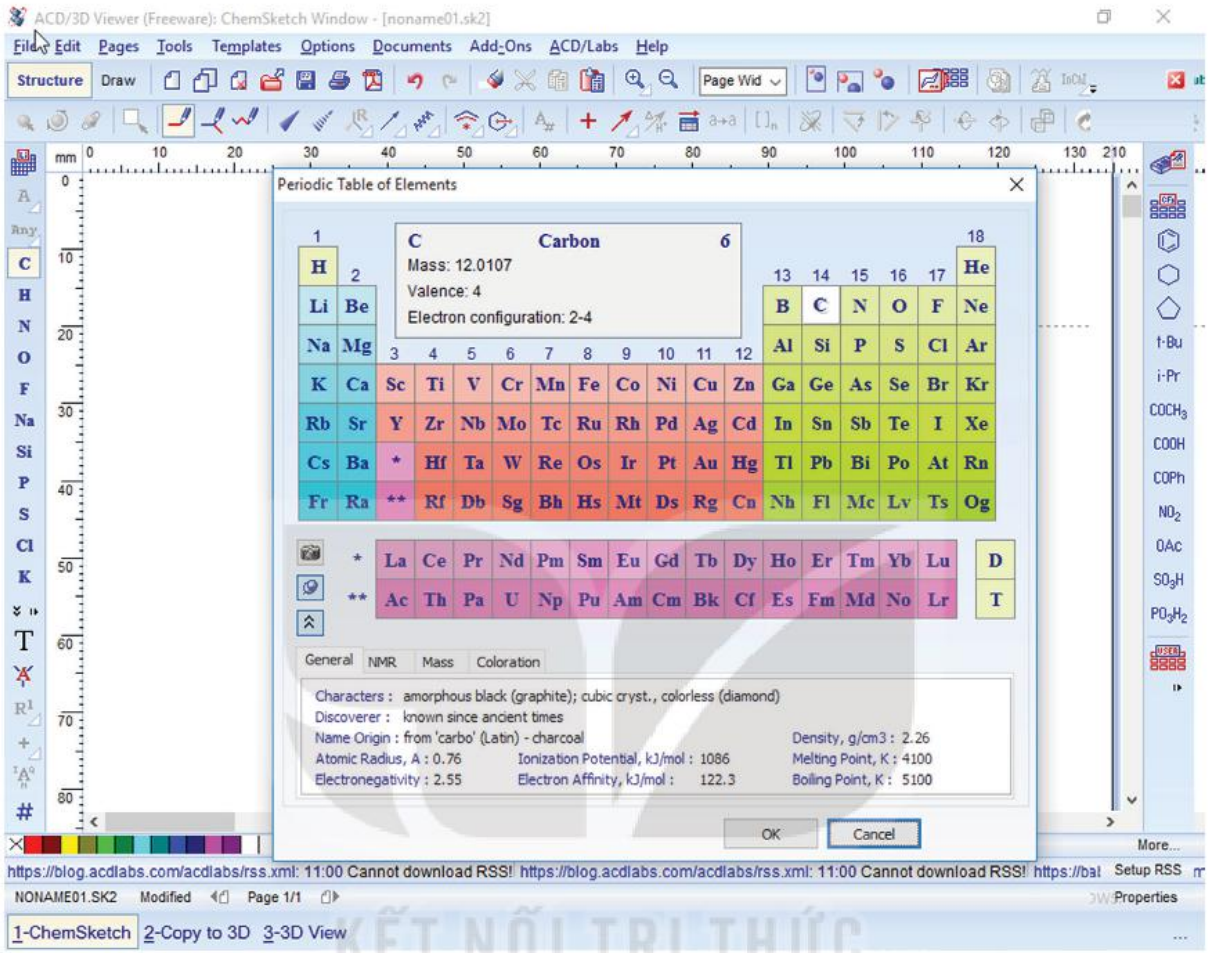
- Bước 1. Mở phần mềm Chemsketch (Hình 9.1).



Hình 9.1. *Thao tác để hiển thị Chemsketch*

(*) *Nguồn: https://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch/index.php.*

- Bước 2. Chọn lệnh xuất hiện các biểu tượng để chọn các nguyên tố hoá học có trong công thức: Trên thanh lệnh bên trái có kí hiệu một số nguyên tố phổ biến → Chọn nguyên tố C. (Với các nguyên tố không có trên thanh lệnh thì nháy chuột vào biểu tượng Bảng tuần hoàn (**Periodic table of Elements**) để chọn – Hình 9.2).



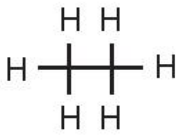
Hình 9.2. *Thao tác để vẽ công thức cấu tạo trong giao diện ChemSketch*

- Bước 3. Chọn nhóm lệnh **Structure**, sau đó nháy vào biểu tượng (**Draw Normal**) để vẽ công thức cấu tạo của các chất đã cho liên kết C—C. Ví dụ: sau bước 3, công thức của C_2H_6 có dạng $H_3C—CH_3$.

  Với các hợp chất có liên kết đôi, liên kết ba (C=C, C≡C) nháy tiếp chuột vào liên kết đơn (C—C) để tăng số liên kết.

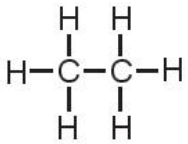
- Bước 4. Để hiển thị các liên kết C—H, đi đến **Tools**, chọn **Add Explicit Hydrogens**.

  Ví dụ: Sau bước 4, thu được công thức của C_2H_6 có dạng:



- Bước 5. Để hiển thị kí hiệu nguyên tử carbon, nháy chuột vào biểu tượng chữ A (**Edit Atom Label**). Nháy vào vị trí của nguyên tử carbon trong công thức cấu tạo trên, gõ "C" rồi nháy vào **Insert**.

  Ví dụ: Sau bước 5, thu được công thức cấu tạo của C_2H_6.



KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Bước 6. Lưu file: chọn lệnh **File** → **Save** hoặc **Save as** → Đặt tên file, chọn kiểu file (.gif, hoặc .jpg, hoặc .tif,…) → **Save**.

Chú ý:

– Để lưu file công thức cấu tạo đã vẽ dưới dạng có thể mở bằng phần mềm ChemSketch và chỉnh sửa được, chọn kiểu file là ChemSketch (.sk2).

– Để xoá một công thức cấu tạo đã vẽ, chọn **Pages** → **Delete**, hoặc nháy chuột vào **Select/Move** → **Delete**.

– Để vẽ một công thức cấu tạo mới trong ChemSketch, chọn **Pages** → **New**, hoặc nháy chuột **New Page**.

– Giải thích một số biểu tượng khác:

(**Draw Chains**): vẽ công thức cấu tạo của chất có nhiều liên kết nối tiếp nhau, gấp khúc.

(**Coordinating Bond**): vẽ công thức cấu tạo có liên kết cho – nhận.

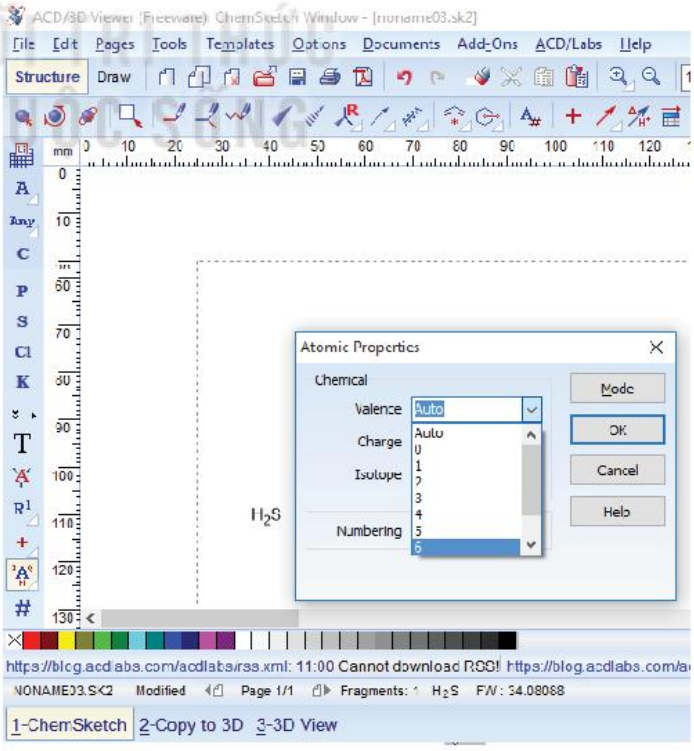
(**Set Bond Horizontally, Set Bond Vertically**): để chỉnh lại các liên kết trong công thức cấu tạo (xoay liên kết nằm ngang hoặc thẳng đứng).

1. Vẽ công thức cấu tạo của các chất C_3H_8, C_3H_6 và C_3H_4.

Hoạt động 2: Vẽ công thức cấu tạo của sulfuric acid (H_2SO_4).

Cách tiến hành:

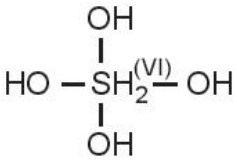
- Các bước 1, 2 thực hiện tương tự như hoạt động 1. Ở bước 2, trong Bảng tuần hoàn (**Periodic Table of Elements**) hoặc ở cột bên trái → Chọn nguyên tố S → Nháy chuột trái vào màn hình soạn thảo. Màn hình xuất hiện công thức H_2S.
- Bước 3. Chọn biểu tượng (**Atom Chemical Properties**) → nháy chuột vào nguyên tử S trong công thức H_2S → **Atomic Properties** → **Valence** (Hoá trị), chọn hoá trị 6 → OK. Màn hình xuất hiện công thức $H_6S^{(VI)}$ (Hình 9.3).



***Hình 9.3**. Thao tác chọn hoá trị*

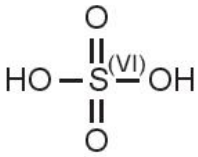
- Bước 4. Chọn nguyên tố O rồi nháy chuột trái vào nguyên tử S trong công thức H_6S, giữ và kéo chuột sang trái, phải, trên, dưới.

  Màn hình xuất hiện công thức:



- Bước 5. Chọn biểu tượng (**Draw Normal**), nháy vào hai liên kết S—OH trong công thức trên.

  Màn hình xuất hiện công thức cấu tạo của sulfuric acid:



2. Vì sao ở hoạt động 1, vẽ công thức cấu tạo của C_2H_6, C_2H_4 và C_2H_2 không cần thực hiện bước chọn hoá trị cho nguyên tử carbon?
3. Vẽ công thức cấu tạo của nitric acid HNO_3 trong giao diện ChemSketch.

Hoạt động 3: Vẽ công thức Lewis của ammonia (NH_3).

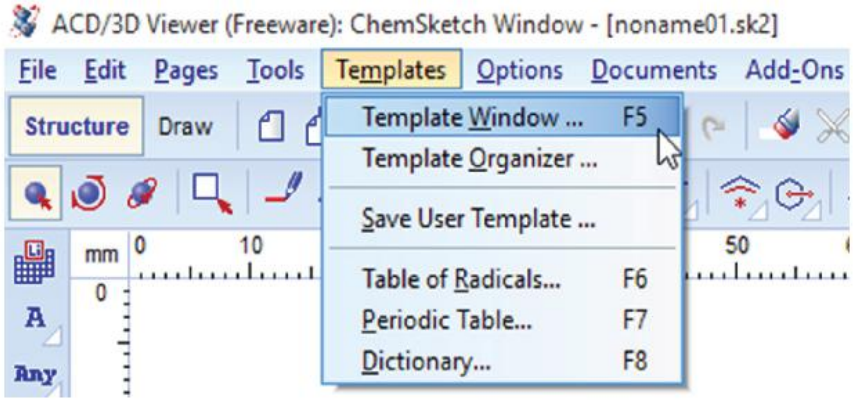
Cách tiến hành:

- Các bước 1, 2 thực hiện tương tự như hoạt động 1. Ở bước 2, trong Bảng tuần hoàn (**Periodic Table of Elements**) → Chọn nguyên tố N → Nháy chuột trái vào màn hình soạn thảo. Màn hình xuất hiện công thức NH_3.
- Bước 3. Để hiển thị các liên kết N–H, chọn nguyên tử H → nháy chuột vào công thức NH_3, giữ chuột và lần lượt kéo chuột sang trái, phải, trên, dưới theo các phía cho đủ các vạch liên kết.

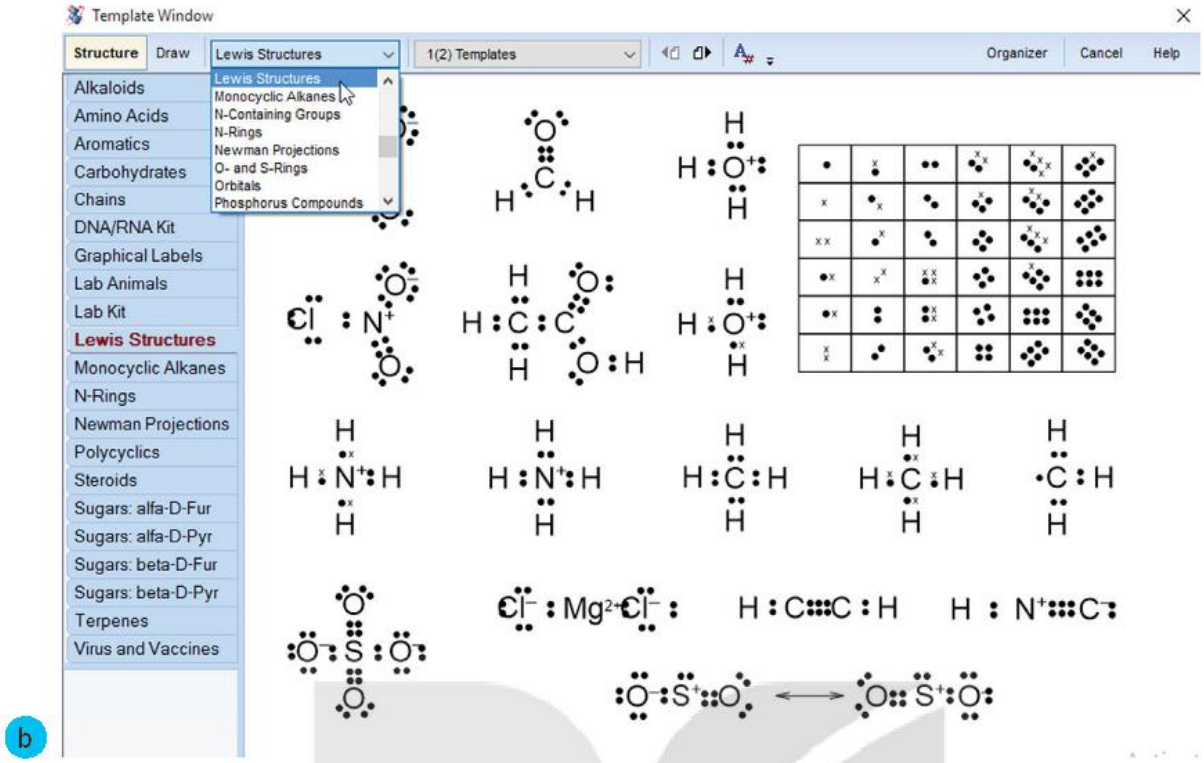
  Màn hình xuất hiện công thức:

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

- Bước 4. Chọn nhóm lệnh **Templates** → **Template Window** (Hình 9.4a) → **Structure** → **Lewis Structures** (Hình 9.4b).

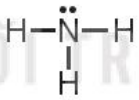


a



Hình 9.4. *Các bước vẽ công thức Lewis:*
a) Thao tác đi đến Template Window; b) Trong Template Window chọn Lewis Structures.

- Bước 5: Nháy chuột vào ô hai dấu chấm nằm ngang ở bảng phía trên bên phải cửa sổ Template và nháy vào phía trên nguyên tử N trong công thức cấu tạo của NH_3. Màn hình xuất hiện công thức:



Chú ý: Nháy chuột vào biểu tượng (**Select**), chọn toàn bộ công thức Lewis vừa vẽ, sau đó nháy chuột vào biểu tượng (**Group**) để di chuyển được toàn bộ công thức.

4. Vẽ công thức Lewis của nước (H_2O).

2. Hiển thị cấu trúc phân tử ba chiều của một số chất

Chọn chế độ hiển thị 3D của phần mềm Chemsketch.

– Trong nhóm lệnh **ACD/Labs**, chọn **3D viewer**. Nền màn hình hiển thị 3D thường mặc định có màu đen.

– Chọn nhóm lệnh **Options** → **Colors** (lựa chọn màu sắc). Hộp thoại Colors xuất hiện:

+ Ở ô Background (màu nền) chọn White (nền trắng).

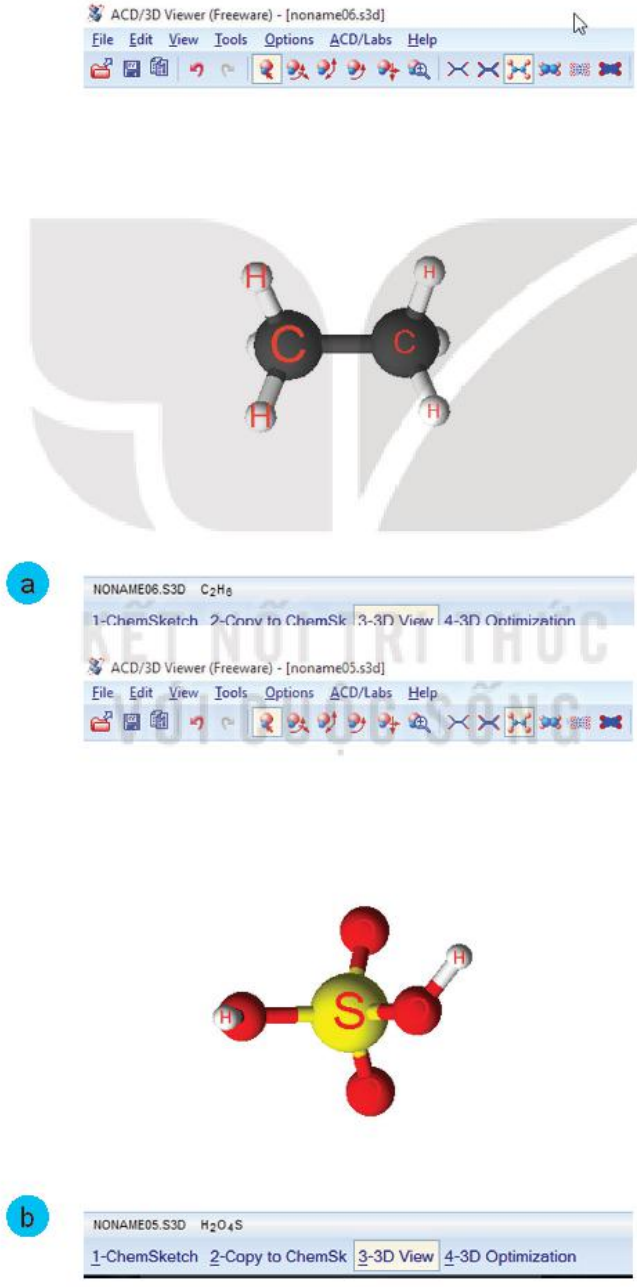
+ Ở ô Elements: chọn màu sắc cho các nguyên tố thông dụng. Ví dụ: Hydrogen màu trắng (white), carbon màu đen, oxygen màu đỏ, nitrogen màu xanh lam. Chọn OK.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Hoạt động 4: Hiển thị cấu trúc phân tử của ethane (C_2H_6) và sulfuric acid (H_2SO_4) dưới dạng 3D.

Cách tiến hành:

- Bước 1: Vẽ công thức C_2H_6 và H_2SO_4. (Thực hiện như các hoạt động 1, 2).
- Bước 2: Nháy chuột vào biểu tượng tối ưu cấu trúc 3D (**3D Optimization**) ở phía trên, gần giữa bên phải màn hình ChemSketch.
- Bước 3: Nháy chuột vào công cụ **2-Copy to 3D** ở góc dưới, bên trái màn hình. Khi đó cấu trúc không gian ba chiều của các phân tử C_2H_6 và H_2SO_4 xuất hiện trong màn hình 3D Viewer (Hình 9.5a,b).



Hình 9.5. *Cấu trúc 3D của các phân tử*
a) C_2H_6, b) H_2SO_4 được hiển thị trong giao diện 3D Viewer

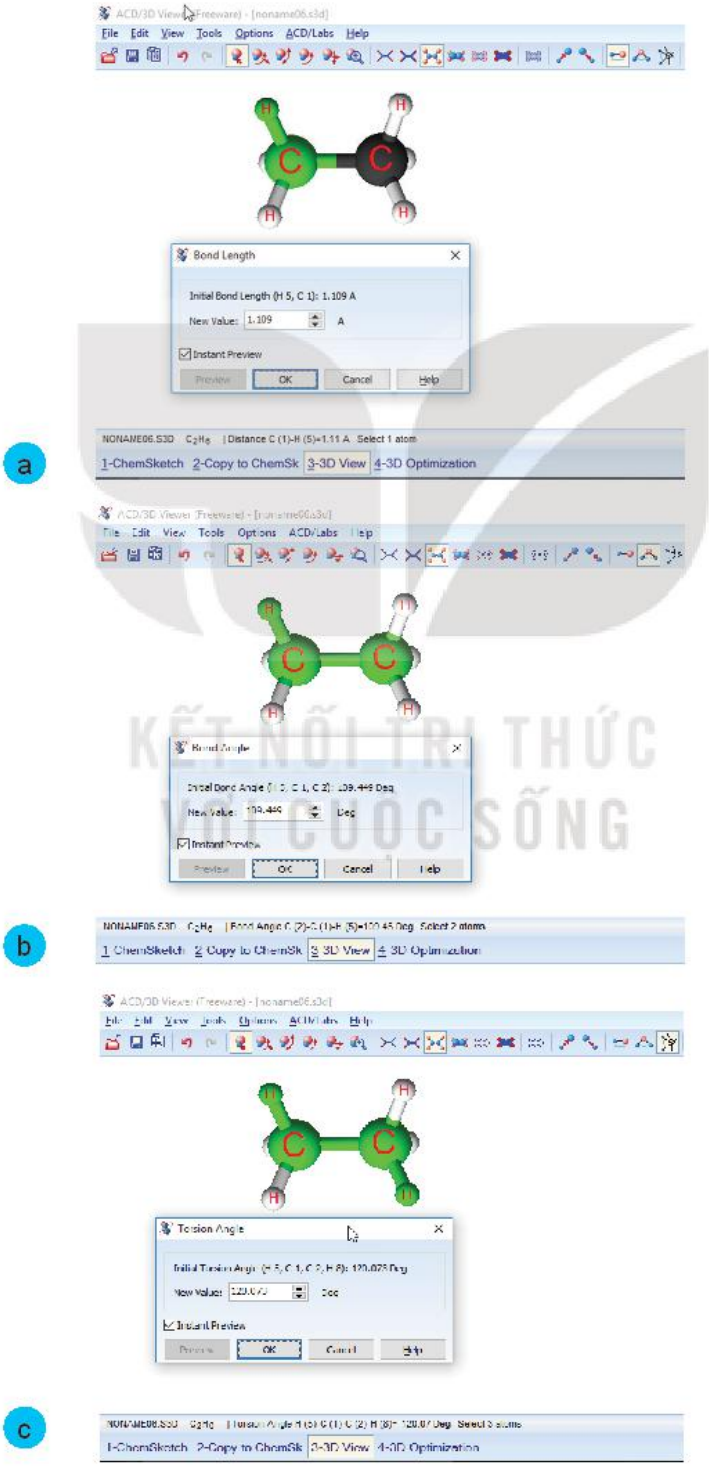
Chú ý:

Giải thích một số biểu tượng trên thanh công cụ của giao diện 3D Viewer:

– : xoay hoặc di chuyển cấu trúc.

– (**Balls and Sticks** và **Spacefill**): biểu diễn cấu trúc 3D ở dạng quả cầu – que nối hoặc ở dạng mô hình đặc.

– (**Bond Length**, **Bond Angle** và **Torsion Angle**): hiển thị các tham số cấu trúc như độ dài liên kết, góc liên kết và góc nhị diện (Xem Hình 9.6).



Hình 9.6. *Cách hiển thị các tham số cấu trúc của phân tử C_2H_6.*
a) Độ dài liên kết C—H; b) Góc liên kết HCC; c) Một góc nhị diện HCCH.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

5. Vẽ công thức cấu tạo trong giao diện ChemSketch, hiển thị cấu trúc và các tham số cấu trúc trong 3D View của các phân tử CH_4, NH_3, H_2O.

II CHÈN HÌNH ẢNH VÀO FILE WORD, POWERPOINT

Có thể sao chép các công thức cấu tạo, công thức Lewis đã vẽ hoặc các cấu trúc phân tử đã hiển thị bằng 3D View vào các ứng dụng khác như file Word hoặc PowerPoint dưới dạng có thể chỉnh sửa hoặc dưới dạng hình ảnh tĩnh.

1. Sao chép dưới dạng có thể chỉnh sửa

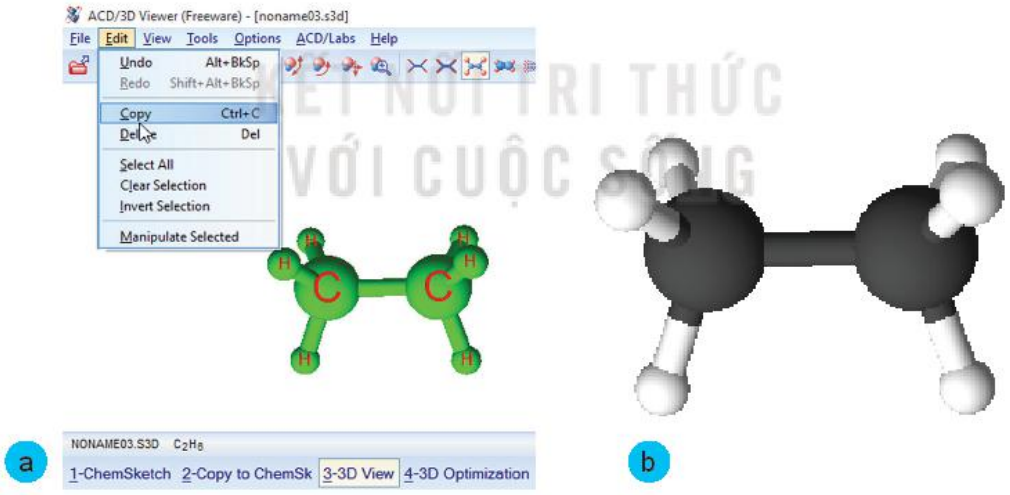
Khi sao chép dưới dạng một công thức (hoặc mô hình) phân tử có thể chỉnh sửa nghĩa là sau khi sao chép có thể thực hiện chỉnh sửa hình ảnh đó bằng link trực tiếp. Sau khi chỉnh sửa và lưu, các thay đổi sẽ được lưu lại trong ứng dụng nơi đã dán hình ảnh.

Hoạt động 5: Sao chép công thức hoặc mô hình phân tử sang file Word hoặc PowerPoint dưới dạng có thể chỉnh sửa.

a) Sao chép công thức hoặc mô hình vào phần mềm khác (Word hoặc PowerPoint)

Cách tiến hành:

- Bước 1. Chọn công thức hoặc mô hình đã vẽ: nhấn tổ hợp phím (**Ctrl + A**).
- Bước 2. Chọn lệnh **Edit** → **Copy**.
- Bước 3. Trong ứng dụng phần mềm khác (Word hoặc PowerPoint), nhấn tổ hợp phím **Ctrl + V** để dán mô hình vào một tệp đang mở (Hình 9.7b).



Hình 9.7.
a) Thao tác copy cấu trúc phân tử C_2H_6 trong giao diện 3D View;
b) Cấu trúc phân tử C_2H_6 được sao chép sang file Word

b) Chỉnh sửa công thức hoặc mô hình phân tử đã dán

Cách tiến hành:

- Bước 1. Trong ứng dụng Word hoặc PowerPoint, nháy đúp chuột vào hình ảnh. Công thức (hoặc mô hình) được mở trong giao diện Chemsketch (hoặc 3D View).

- Bước 2. Chỉnh sửa mô hình.
- Bước 3. Sau khi sửa xong, chọn lệnh **File** → **Exit**. Công thức mới sửa sẽ được cập nhật trên ứng dụng mà mô hình được dán.

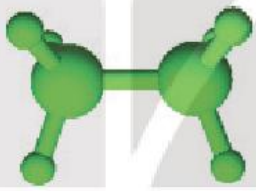
c) Sao chép dưới dạng hình ảnh tĩnh

Khi sao chép công thức hoặc mô hình phân tử dưới dạng tệp bitmap hoặc tệp meta (Windows Metafile) vào các ứng dụng khác, các tệp này sẽ trở thành hình ảnh tĩnh và không thể sửa đổi. Các tệp bitmap và windows metafile thường có kích thước tệp nhỏ hơn mô hình cấu trúc phân tử ở dạng có thể chỉnh sửa như trên.

Hoạt động 6: Sao chép công thức hoặc mô hình phân tử sang file Word hoặc PowerPoint dưới dạng hình ảnh tĩnh.

Cách tiến hành:

- Bước 1. Chọn mô hình.
- Bước 2. Chọn lệnh **Edit** → **Copy**.
- Bước 3. Trong ứng dụng phần mềm khác (Word hoặc PowerPoint), chọn **Home** → **Paste** → **Paste Special** và chọn Bitmap hoặc Picture (Windows Metafile) để dán mô hình vào một tệp đang mở (Hình 9.8).



Hình 9.8. *Ảnh cấu trúc phân tử C_2H_6 dạng Bitmap*

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

EM ĐÃ HỌC

Cách vẽ một công thức cấu tạo, công thức Lewis của một số chất vô cơ và hữu cơ. Chèn được hình ảnh đã vẽ vào file Word hoặc PowerPoint.

EM CÓ THỂ

Sử dụng phần mềm để biểu diễn cấu tạo của một số chất, từ đó hiểu được mối liên hệ giữa cấu tạo và tính chất của chất.

BÀI 10

THỰC HÀNH THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC ẢO

MỤC TIÊU

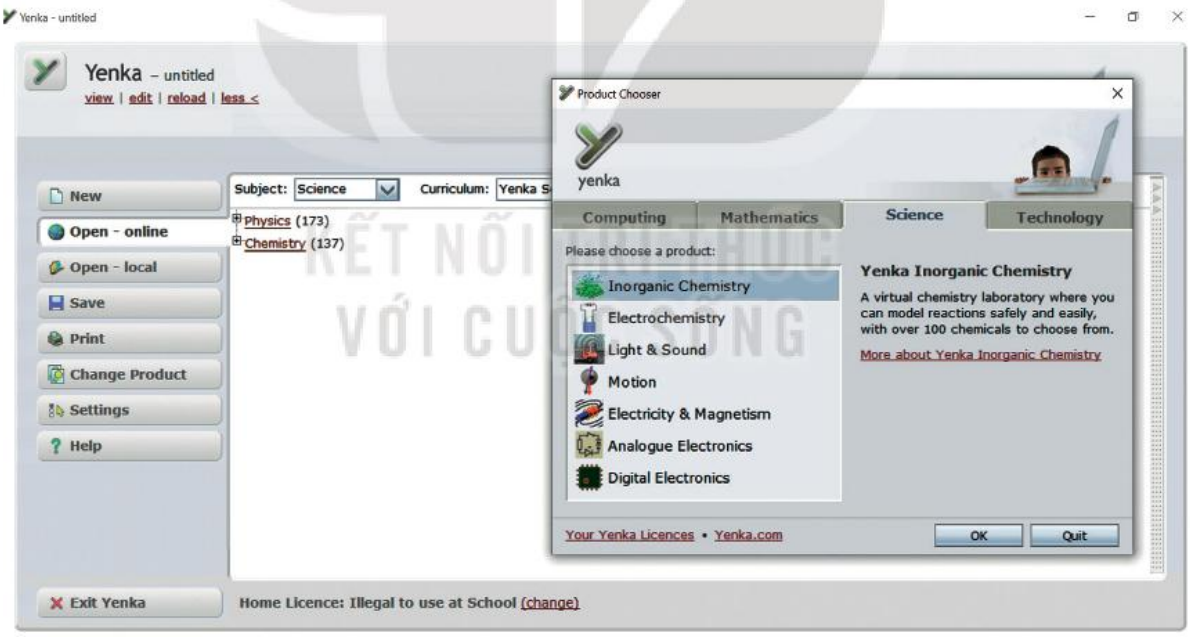
Thực hiện được các thí nghiệm ảo theo nội dung được cho trước từ giáo viên. Phân tích và lí giải được kết quả thí nghiệm ảo.

Làm thế nào thực hiện được các thí nghiệm hoá học ảo trên máy tính?

I MỞ ĐẦU

Hiện nay có một số phần mềm để mô phỏng thí nghiệm hoá học ảo như Portable Virtual Chemistry Lab hay ChemLab, Yenka,... Trong bài học này, phần mềm Yenka(*) được sử dụng mang tính chất ví dụ.

Khi khởi động phần mềm, giao diện của phần mềm Yenka xuất hiện (Hình 10.1).



Hình 10.1. *Giao diện của phần mềm Yenka*

Trên cửa sổ có những thẻ sau:

– **New:** sử dụng kho chứa các hoá chất và dụng cụ thí nghiệm của phần mềm Yenka để tạo những mô phỏng thí nghiệm mới.

– **Open-local:** kho chứa các mô phỏng thí nghiệm theo chủ đề có sẵn trong phần mềm.

(*) *Nguồn: https://yenka.com/en/Free_teacher_home_licences/*

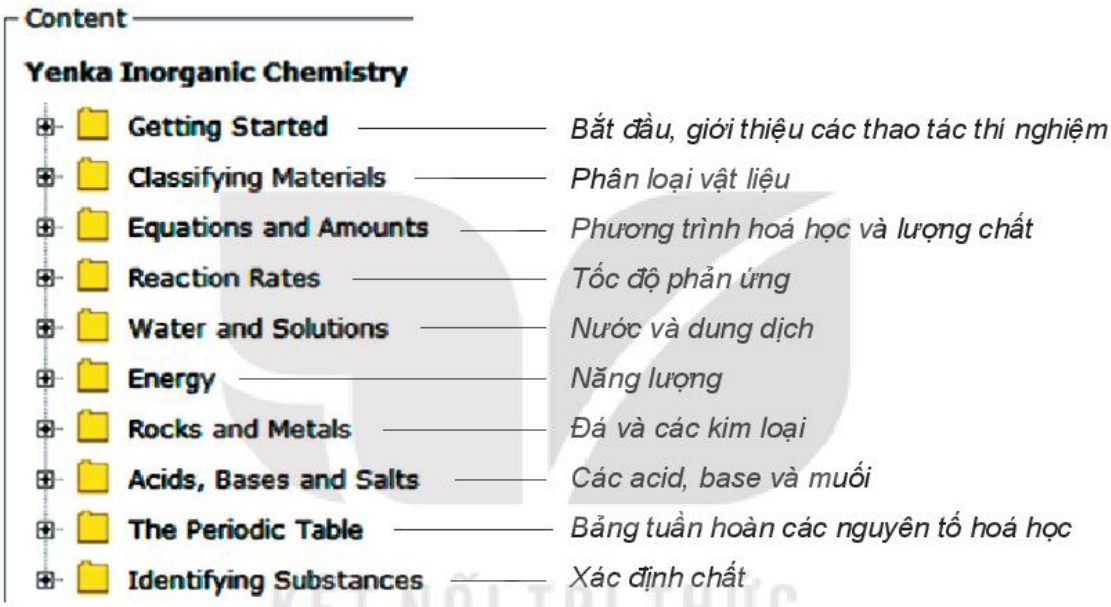
Tuỳ vào mục đích để chọn một trong các công cụ này. Ở mục II sẽ hướng dẫn các em cách thực hiện mô phỏng theo chủ đề có sẵn trong phần mềm bằng thẻ **Open-local** và cách tự thiết kế mô phỏng một thí nghiệm bằng thẻ **New**.

II MÔ PHỎNG THÍ NGHIỆM HOÁ HỌC

1. Dùng thí nghiệm được thiết kế sẵn

Thẻ **Open-local** là một kho chứa các thí nghiệm đã được mô phỏng. Các thí nghiệm này được sắp xếp theo các chủ đề. Nháy chuột vào **(change)** để thay đổi chủ đề.

Nội dung của các chủ đề hoá vô cơ cụ thể như sau:



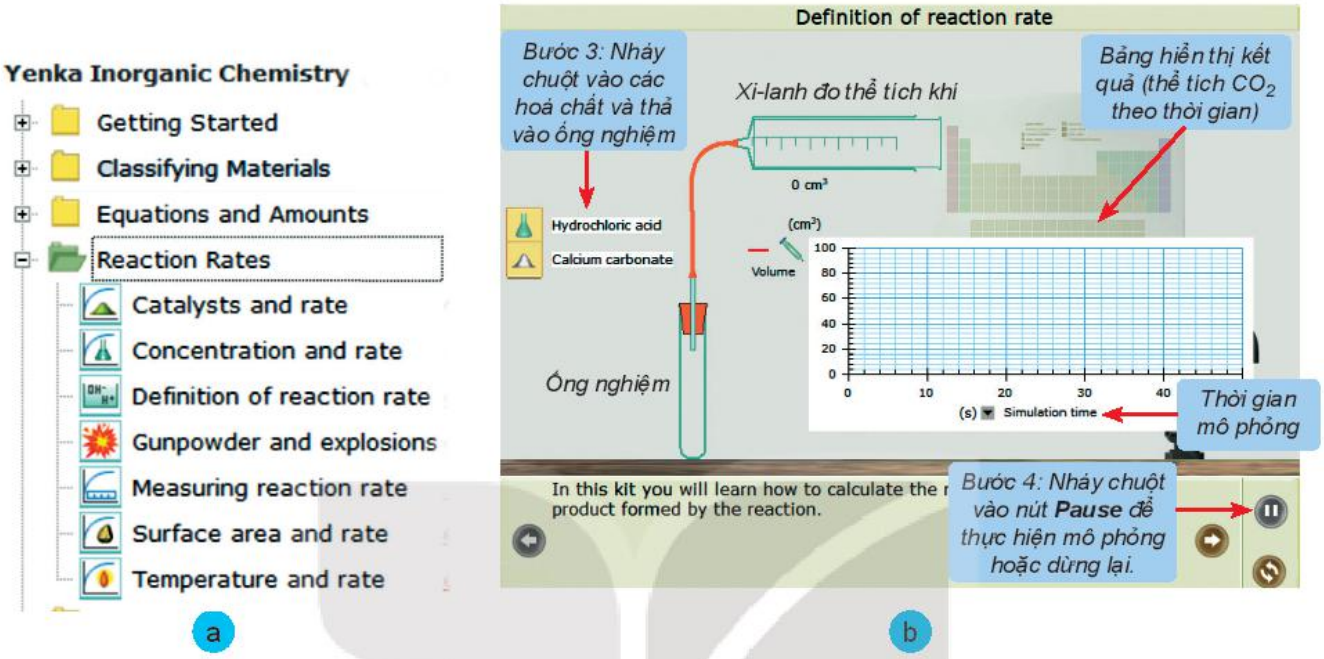
Hoạt động 1: Sử dụng thẻ **Open-local** để mô phỏng thí nghiệm đo tốc độ phản ứng: $2HCl(aq) + CaCO_3(s) \longrightarrow CaCl_2(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$ (1).

Cách tiến hành:

- Bước 1. Nháy chuột vào thẻ **Open-local**, chọn **Reaction Rates**.
- Bước 2. Nháy chuột vào Definition of reaction rate (Định nghĩa tốc độ phản ứng) (Hình 10.2a). Một mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình bên phải.
- Bước 3. Nháy chuột trái vào dòng chữ chỉ hoá chất **Calcium carbonate** rồi kéo thả vào ống nghiệm (Test tube), sau đó kéo thả hoá chất **Hydrochloric acid** vào ống nghiệm.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

- Bước 4. Nháy chuột vào nút **Pause** ở góc dưới bên phải của màn hình mô phỏng để thực hiện mô phỏng. Sau khoảng 20 giây trên trục thời gian mô phỏng, nháy chuột lại vào nút **Pause** để dừng mô phỏng. Khi đó trên bảng giấy kẻ ô ở màn hình mô phỏng xuất hiện đường cong màu đỏ biểu diễn thể tích khí CO_2 thu được theo thời gian (Hình 10.2b).



Hình 10.2. *Các bước mô phỏng các thí nghiệm về đo tốc độ phản ứng*

1. Hãy tính tốc độ trung bình của phản ứng (1) trong khoảng thời gian từ 0 đến 20 giây theo thể tích CO_2.

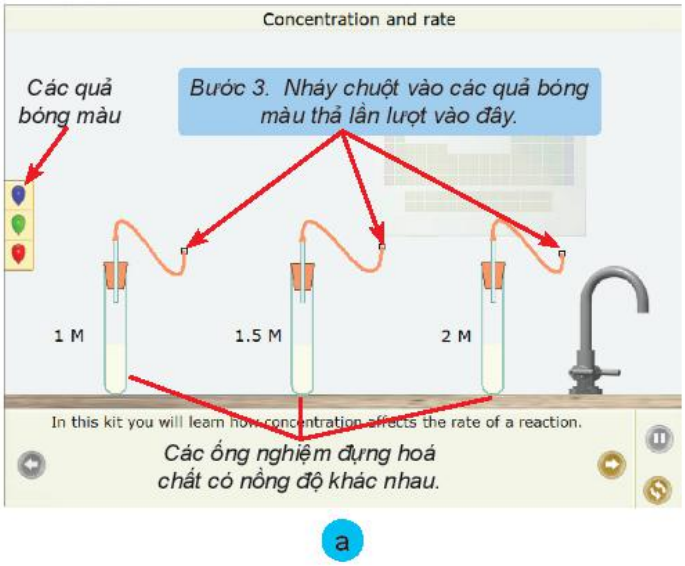
Hoạt động 2: Sử dụng thẻ **Open-local** để mô phỏng thí nghiệm về ảnh hưởng của nồng độ acid HCl đến tốc độ phản ứng

$$2HCl(aq) + CaCO_3(s) \longrightarrow CaCl_2(aq) + CO_2(g) + H_2O(l)$$

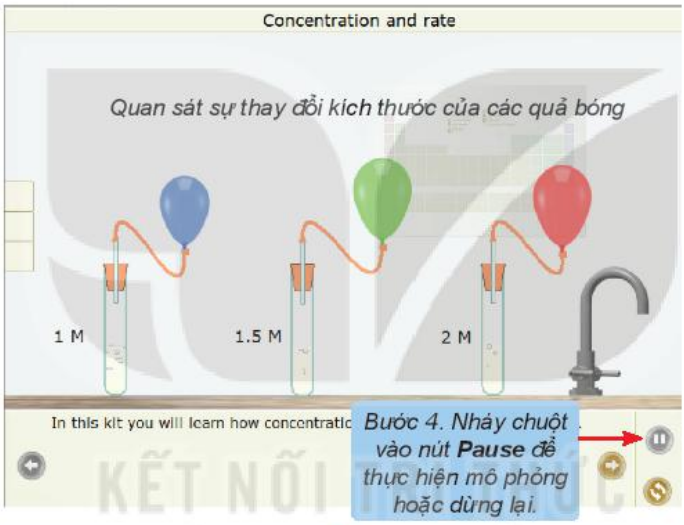
Cách tiến hành:

- Bước 1. Nháy chuột vào thẻ **Open-local**, chọn **Reaction Rates**.
- Bước 2. Nháy chuột vào **Concentration and rate** (ảnh hưởng của nồng độ lên tốc độ phản ứng). Một mô phỏng đã được thiết kế xuất hiện ở màn hình bên phải.
- Bước 3. Nháy chuột vào các quả bóng có màu khác nhau, kéo thả vào cuối ống dẫn khí ở các ống nghiệm có nồng độ khác nhau (Hình 10.3a).
- Bước 4. Nháy chuột vào nút **Pause** để thực hiện mô phỏng. Sau khoảng 9 giây nháy chuột lại vào nút **Pause** để dừng mô phỏng (Hình 10.3b).

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG



a



b

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Hình 10.3. *Các bước mô phỏng thí nghiệm về ảnh hưởng của nồng độ lên tốc độ phản ứng*

2. Khi khí thoát ra, các quả bóng to dần lên. Hãy quan sát tốc độ tăng dần kích thước của các quả bóng và cho biết tốc độ thoát khí CO_2 ở ống nghiệm nào nhanh nhất, ở ống nghiệm nào chậm nhất? Nồng độ ảnh hưởng như thế nào đến tốc độ phản ứng?

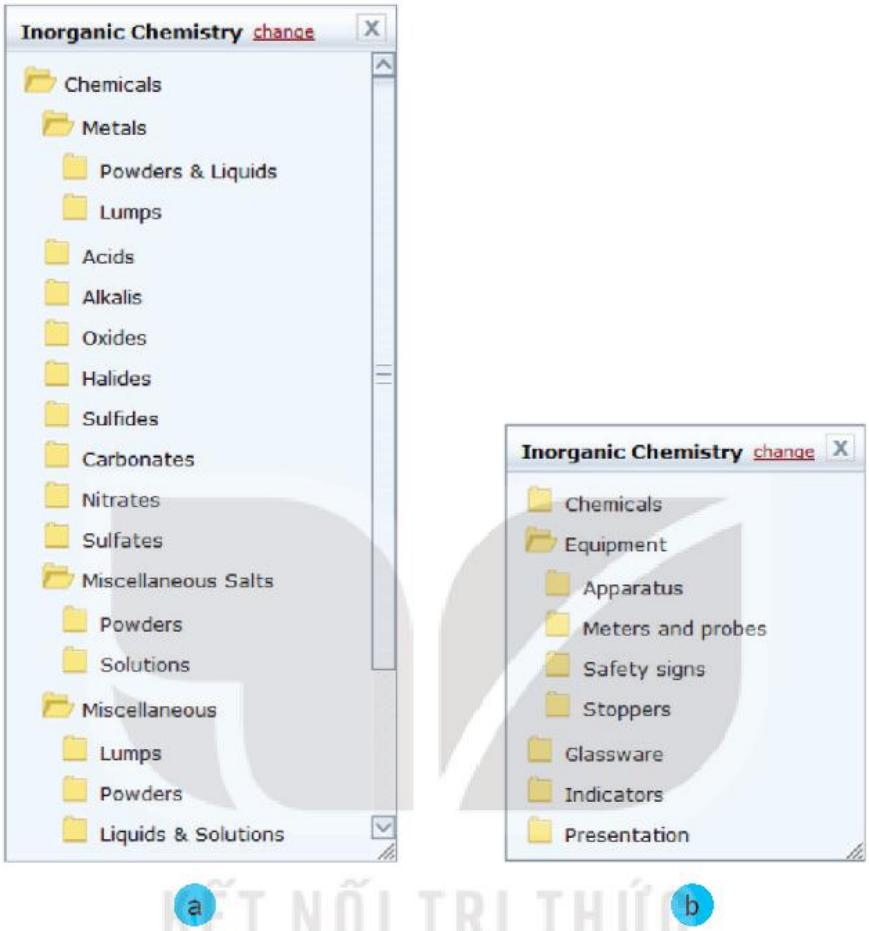
3. Sử dụng thẻ **Open-local** để mô phỏng các thí nghiệm sau:

– Thí nghiệm ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ của phản ứng (giữa $CaCO_3(s)$ và $HCl(aq)$).

– Thí nghiệm ảnh hưởng của chất xúc tác MnO_2 đến tốc độ phản ứng phân huỷ $H_2O_2(aq)$.

2. Tự thiết kế mô phỏng một thí nghiệm

Để thiết kế một mô phỏng thí nghiệm hoá học với phần mềm Yenka, các hoá chất (**Chemicals**) và thiết bị, dụng cụ thí nghiệm (**Equipments**) sẽ được lấy trong thẻ **New** (Hình 10.4).



Hình 10.4. *a) Giao diện hoá chất; b) giao diện thiết bị và dụng cụ thí nghiệm.*

- *Chemical (Hoá chất)*

  Kho hoá chất chứa các loại hoá chất bao gồm kim loại (Metals), Acids, Alkalis (base), Oxides, Halides, Sulfides, Sulfates, Carbonates, Nitrate, các loại muối khác (Miscellaneous Salts),…

– Dạng bột (power), dạng cục, miếng (lumps), dạng lỏng (liquid), dạng khí (gas).

– Dạng bột mịn (fine), mịn vừa (medium), thô (coarse).

  Cách chọn hoá chất: Mở kho hoá chất, nháy chuột vào biểu tượng hoá chất cần lấy, kéo ra vùng thực hiện thí nghiệm.

- *Thiết bị, dụng cụ thí nghiệm (Equipment, Glassware)*

  Kho thiết bị, dụng cụ thí nghiệm bao gồm đầy đủ các thiết bị, dụng cụ thí nghiệm hoá học thông dụng dùng trong các nhà trường phổ thông (Hình 10.4b).

  Cách chọn thiết bị, dụng cụ: Nháy chuột vào dụng cụ thí nghiệm cần chọn, kéo vào vùng thực hiện thí nghiệm và đặt tại vị trí thích hợp.

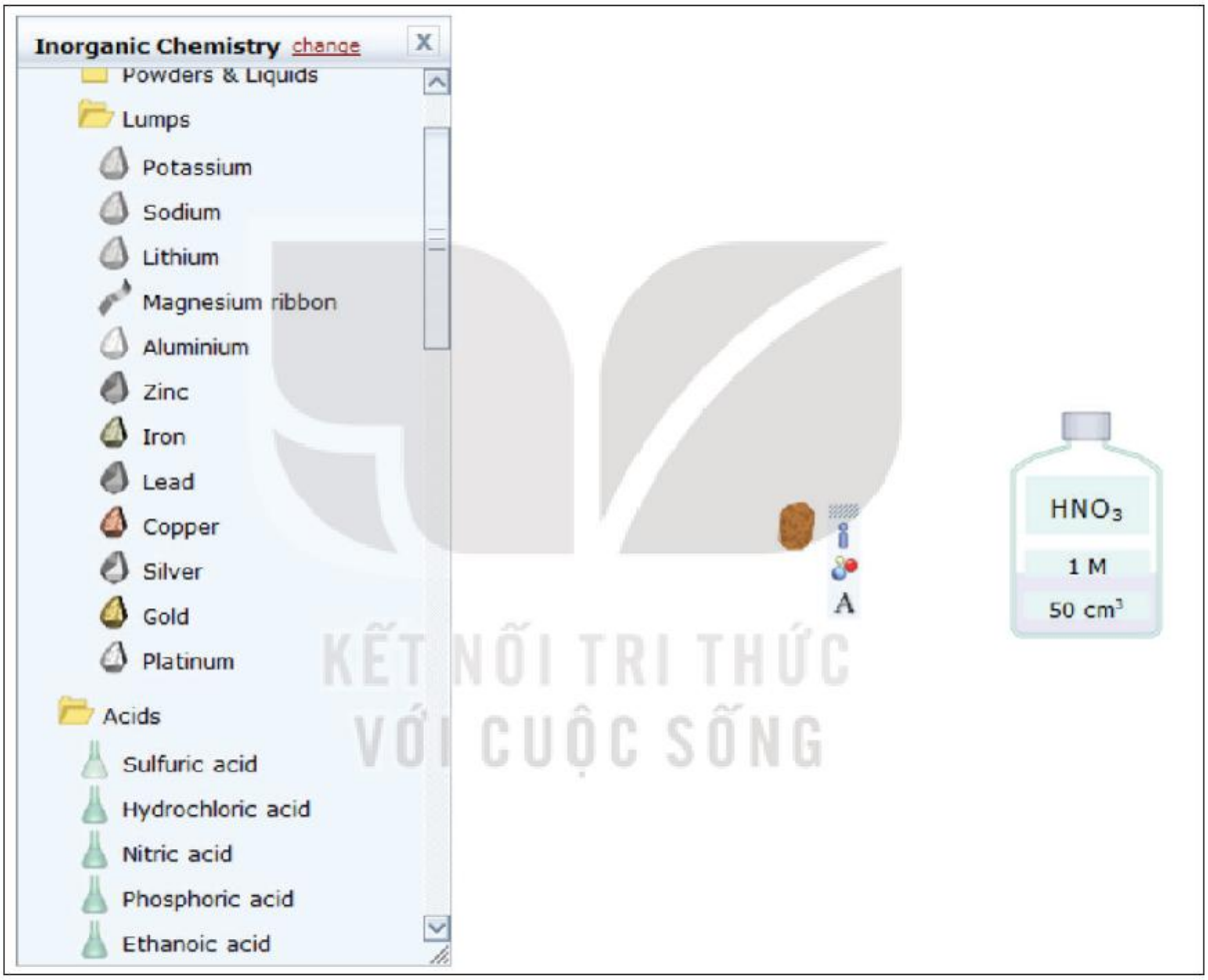
KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Hoạt động 3: Sử dụng thẻ **New** để mô phỏng thí nghiệm copper tác dụng với dung dịch nitric acid.

Cách tiến hành:

- Bước 1. Nháy chuột vào thẻ **New**, chọn hoá chất (Chemicals).

  Nháy chuột vào **Chemicals** → **Metals** → **Lumps** → **Copper**, kéo thả sang màn hình mô phỏng. Để chọn nitric acid, nháy chuột vào **Chemical** → **Acids**. Nháy chuột vào Nitric acid, kéo thả sang màn hình mô phỏng (Hình 10.5).



Hình 10.5. *Chọn hoá chất copper và nitric acid*

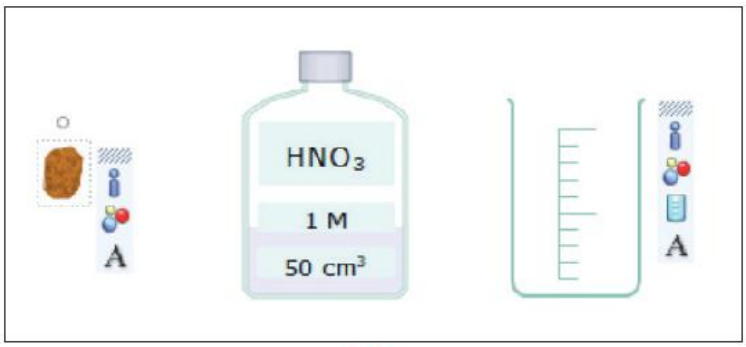
- Bước 2. Chọn thiết bị, dụng cụ.

  Nháy chuột vào công cụ **Glassware** → **Standard**, sau đó nháy chuột vào **Beaker 100 mL** (cốc thuỷ tinh 100 mL), kéo và thả sang màn hình mô phỏng (Hình 10.6a).

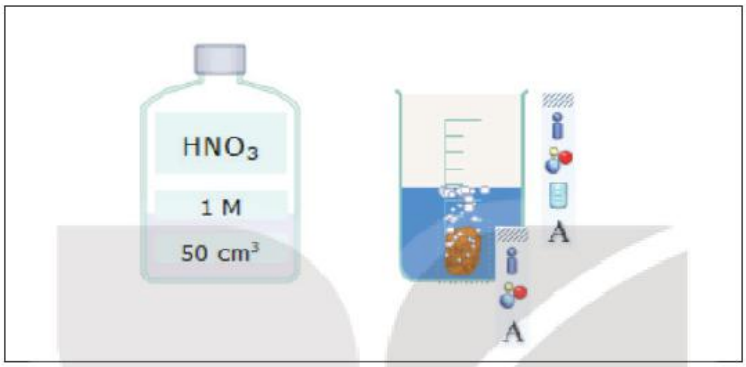
- Bước 3. Mô phỏng phản ứng.

  Nháy chuột vào copper, kéo thả vào cốc thuỷ tinh; nháy chuột vào bình nitric acid, kéo thả vào cốc thuỷ tinh (Hình 10.6b).

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG



a



b

Hình 10.6. *Thiết kế mô phỏng thí nghiệm copper tác dụng với acid nitric*

a) Chọn hoá chất, thiết bị, dụng cụ ; b) Mô phỏng phản ứng

4. Nêu hiện tượng và viết phương trình hoá học của phản ứng giữa copper và nitric acid.

KẾT NỐI TRI THỨC
VỚI CUỘC SỐNG

EM ĐÃ HỌC

Cách thực hiện một số thí nghiệm hoá học ảo, phân tích và lí giải được các thí nghiệm đó.

EM CÓ THỂ

Sử dụng phần mềm để mô phỏng một số thí nghiệm hoá học ảo. So sánh ưu điểm và nhược điểm của việc tiến hành thí nghiệm hoá học trên máy tính và trong thực tế.

BÀI 11

THỰC HÀNH TÍNH THAM SỐ CẤU TRÚC VÀ NĂNG LƯỢNG

MỤC TIÊU

- Nêu được quy trình tính toán bằng phương pháp bán kinh nghiệm (nhập file đầu vào, chọn phương pháp tính, thực hiện tính toán, lưu kết quả).
- Sử dụng được kết quả tính toán để thấy được hình học phân tử, xu hướng thay đổi độ dài, góc liên kết và năng lượng phân tử trong dãy các chất (cùng nhóm, chu kì, dãy đồng đẳng,...).

Không dùng máy móc thí nghiệm, bằng máy tính làm thế nào để giải thích mối quan hệ giữa cấu tạo phân tử và tính chất của chất?

I MỞ ĐẦU

Trước đây, hoá học chỉ thuần tuý là khoa học thực nghiệm nhưng hiện nay, hoá học tính toán ngày càng phát triển và có vai trò quan trọng khi nghiên cứu các hệ phức tạp, các phản ứng xảy ra ở điều kiện phản ứng khắc nghiệt hoặc khi cần tìm hiểu phản ứng của các chất ở cấp độ phân tử,...

Hoá học tính toán sử dụng một số phương pháp tính dựa trên hai cơ sở:

Cơ học phân tử: Áp dụng các định luật vật lí cổ điển mô tả chuyển động của hạt nhân các nguyên tử trong phân tử mà không cần xem xét chuyển động và vai trò của các electron. Ví dụ phương pháp MM2,...

Cơ học lượng tử: Dựa vào phương trình Schrödinger để mô tả phân tử dựa trên sự chuyển động của electron. Ví dụ: phương pháp *ab initio*, phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT), phương pháp bán kinh nghiệm,... Trong đó phương pháp bán kinh nghiệm là sự đơn giản hoá của phương pháp *ab initio*, sử dụng các hiệu chỉnh theo kinh nghiệm.

Trong bài học này, phần mềm MOPAC(*) sẽ giới thiệu mang tính ví dụ. Phương pháp sử dụng là phương pháp bán kinh nghiệm, ví dụ phương pháp AM1, để giảm khối lượng tính toán.

Phần mềm MOPAC có thể được tải về và cài đặt như sau:

– Đi đến website http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html, tải về phần mềm MOPAC. Lưu và giải nén thư mục phần mềm vào máy tính, ví dụ "D:\Phanmem\MOPAC2016".

Cách khởi chạy phần mềm MOPAC (Windows-10)

- Bước 1. Nháy chuột phải vào file **MOPAC data set**, ví dụ file **Example_data_set.mop**.
- Bước 2. Chọn **Open with**. Bỏ chọn **Always use this app to open .mop files**.
- Bước 3. Nháy chuột trái vào **More apps**. Bỏ chọn **Always use this app to open .mop files**.
- Bước 4. Cuộn xuống dưới và chọn **Look for another app on this PC**.
- Bước 5. Đi đến **D:\Phanmem\MOPAC2016**, nháy chuột trái vào **MOPAC2016.exe**. "MOPAC2016.exe" xuất hiện trong hộp thoại **File name**. Chọn **Open**.

(*) *Nguồn: http://openmopac.net/Download_MOPAC_Executable_Step2.html.*

II TỐI ƯU HOÁ CẤU TRÚC HÌNH HỌC VÀ TÍNH NHIỆT TẠO THÀNH CỦA MỘT CẤU TRÚC PHÂN TỬ BẰNG PHƯƠNG PHÁP BÁN KINH NGHIỆM

1. Tạo file dữ liệu

Tệp dữ liệu MOPAC thường gồm:

– Một dòng từ khoá.

– Hai dòng văn bản do người dùng xác định.

– Ma trận Z mô tả phân tử. Sau ma trận Z phải có một dòng trống hoặc một dòng số 0.

Hoạt động 1: Tạo file dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc của phân tử H_2O.

Cách tiến hành:

• Bước 1. Sử dụng Notepad hoặc Wordpad tạo file dữ liệu. File dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc của phân tử và tính nhiệt hình thành của phân tử H_2O có nội dung như sau:

```
AM1 OPT ENPART
Water
Example of geometry optimization
O   0.0 0    0.0 0   0.0 0
H  0.97  1    0.0 0   0.0 0   1 0 0
H  0.97  1 104.5 1   0.0 0   1 2 0
```

Trong đó:

– Từ khoá AM1 là để sử dụng phương pháp bán kinh nghiệm AM1.

– Từ khoá OPT là để tối ưu hoá cấu trúc hình học. Từ khoá ENPART là để tính năng lượng phân tử.

– Cấu trúc hình học của phân tử H_2O ở file dữ liệu này được hiểu như sau: Nguyên tử thứ nhất là oxygen (O1) được mô tả ở hàng thứ nhất. Nguyên tử thứ 2 là hydrogen (H(2)) được mô tả ở hàng thứ hai, H(2) liên kết với O(1) bằng liên kết có độ dài 0,97 Å. Nguyên tử thứ 3 là hydrogen (H(3)) được mô tả ở hàng thứ ba, H(3) liên kết với O(1) bằng liên kết có độ dài 0,97 Å. Góc H(3)O(1)H(2) = 104,5°.

– Số 0 đứng sau mỗi giá trị độ dài liên kết hay góc liên kết có nghĩa là độ dài liên kết hay góc liên kết này được giữ cố định.

– Số 1 đứng sau mỗi giá trị độ dài liên kết hay góc liên kết có nghĩa là độ dài liên kết hay góc liên kết này sẽ được tối ưu.

• Bước 2. Lưu file dữ liệu vào thư mục "D:\ Nguyen Van A\MOPAC_Working". Kiểu file là ".txt". Ví dụ: "H2O_AM1.txt" → Đóng file vừa soạn thảo "H2O _AM1.txt".

2. Tính nhiệt tạo thành của phân tử bằng phương pháp bán kinh nghiệm

Hoạt động 2: Tối ưu hoá cấu trúc của phân tử H_2O bằng phương pháp bán kinh nghiệm.

Cách tiến hành:

- Bước 1. Đổi file dữ liệu đã tạo (ở hoạt động 1) sang dạng đuôi ".mop", ví dụ: "H2O _AM1.mop". Vào thư mục "D:\Nguyen_Van_A\MOPAC_Working", nháy chuột phải, chọn **Rename** rồi thay đuôi ".txt" thành đuôi ".mop".
- Bước 2. Nháy chuột phải vào file "H2O_AM1.mop"

  Chọn **Open with** → **MOPAC2016**.exe.

  Lúc này file dữ liệu "H2O_AM1.mop" được chạy bằng MOPAC. Sau khi chạy xong, xuất hiện file kết quả tính "H2O_AM1.out" trong thư mục "D:\Nguyen_Van_A\MOPAC_ Working".

III CÁCH ĐỌC FILE KẾT QUẢ VÀ SỬ DỤNG KẾT QUẢ

1. Cách đọc file kết quả

File kết quả thu được từ Hoạt động 2 có các thông tin về nhiệt tạo thành, năng lượng phân tử, độ dài liên kết, góc liên kết của phân tử H_2O sau khi tối ưu theo phương pháp bán kinh nghiệm AM1.

Hoạt động 3: Đọc file kết quả và sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc của phân tử, tính nhiệt tạo thành và năng lượng phân tử của H_2O.

Cách tiến hành:

Nháy chuột phải vào file "H2O _AM1.out", chọn **Open with Wordpad**.

Đoạn văn bản đầu của file như sau:

```
"*******************************************************************************
 ** Site#: 36579       For non-commercial use only       Version 21.125W **
 *******************************************************************************
 ** Cite this program as: MOPAC2016, Version: 21.125W, James J. P. Stewart,   **
 ** Stewart Computational Chemistry, web: HTTP://OpenMOPAC.net. Days left: 361**
 *******************************************************************************
 **                                                   **
 **                    MOPAC2016                      **
 **                                                   **
 *******************************************************************************"
```

Đoạn văn bản kết thúc file "H2O_AM1.out" như sau:

```
"***********************
 *                     *
 * JOB ENDED NORMALLY *
 *                     *
 ***********************
 TOTAL JOB TIME:            0.75 SECONDS
 == MOPAC DONE =="
```

Giá trị nhiệt tạo thành của phân tử H_2O (thể hơi) ở file "H2O_AM1.out":

FINAL HEAT OF FORMATION = –59.25050 KCAL/MOL = –247.90410 KJ/MOL.

Giá trị này khá gần đúng so với giá trị thực nghiệm. Theo thực nghiệm, nhiệt tạo thành của phân tử H_2O(thể hơi) là –241,826 kJ/mol.

Giá trị năng lượng phân tử của H_2O (thể hơi), kí hiệu là ETOT (EONE + ETWO) ở file "H2O_AM1.out":

ETOT (EONE + ETWO) -348.5632 EV

Hoạt động 4: Xác định độ dài liên kết và góc liên kết trong file kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc của H_2O.

Cách tiến hành:

Nháy chuột phải vào file "H2O _AM1.out", chọn **open with Wordpad**, đi đến đoạn văn bản sau:

ATOM NUMBER (I)	CHEMICAL SYMBOL	BOND LENGTH (ANGSTROMS) NA:I		BOND ANGLE (DEGREES) NB:NA:I		TWIST ANGLE (DEGREES) NC:NB:NA:I	NA	NB	NC
1	O	0.00000000		0.0000000		0.0000000	0	0	0
2	H	0.96127310	*	0.0000000		0.0000000	1	0	0
3	H	0.96127244	*	103.5266356	*	0.0000000	1	2	0

Đoạn văn bản này cho thấy độ dài liên kết (bond length) và góc liên kết (bond angle) của phân tử H_2O.

1. Xác định độ dài liên kết O–H và góc liên kết $\overset{\frown}{HOH}$ trong phân tử nước, tính tối ưu được theo phương pháp AM1. Hãy so sánh chúng với giá trị thực nghiệm độ dài liên kết O–H (0,97 Å) và góc liên kết $\overset{\frown}{HOH}$ (104,5°).

2. Sử dụng file kết quả để hiển thị hình học phân tử

Từ kết quả tối ưu hoá cấu trúc bằng phần mềm MOPAC, sử dụng một số phần mềm như Chem3D, Avogadro,... để hiển thị cấu trúc hình học phân tử. Phần mềm Avogadro sẽ được giới thiệu mang tính chất ví dụ.

Cách tải và cài đặt phần mềm Avogadro: Đi đến website https://avogadro.cc/news/avogadro-1-2-0-released/, tải về và lưu file cài đặt của phần mềm Avogadro vào máy tính, ví dụ "D:/Phan mem/Avogadro-1.2.0n-win32.exe".

Vào thư mục, "D:/Phan mem/", nháy chuột vào file Avogadro-1.2.0n-win32.exe để cài đặt phần mềm.

Hoạt động 5: Sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc để thấy được cấu trúc hình học của phân tử H_2O.

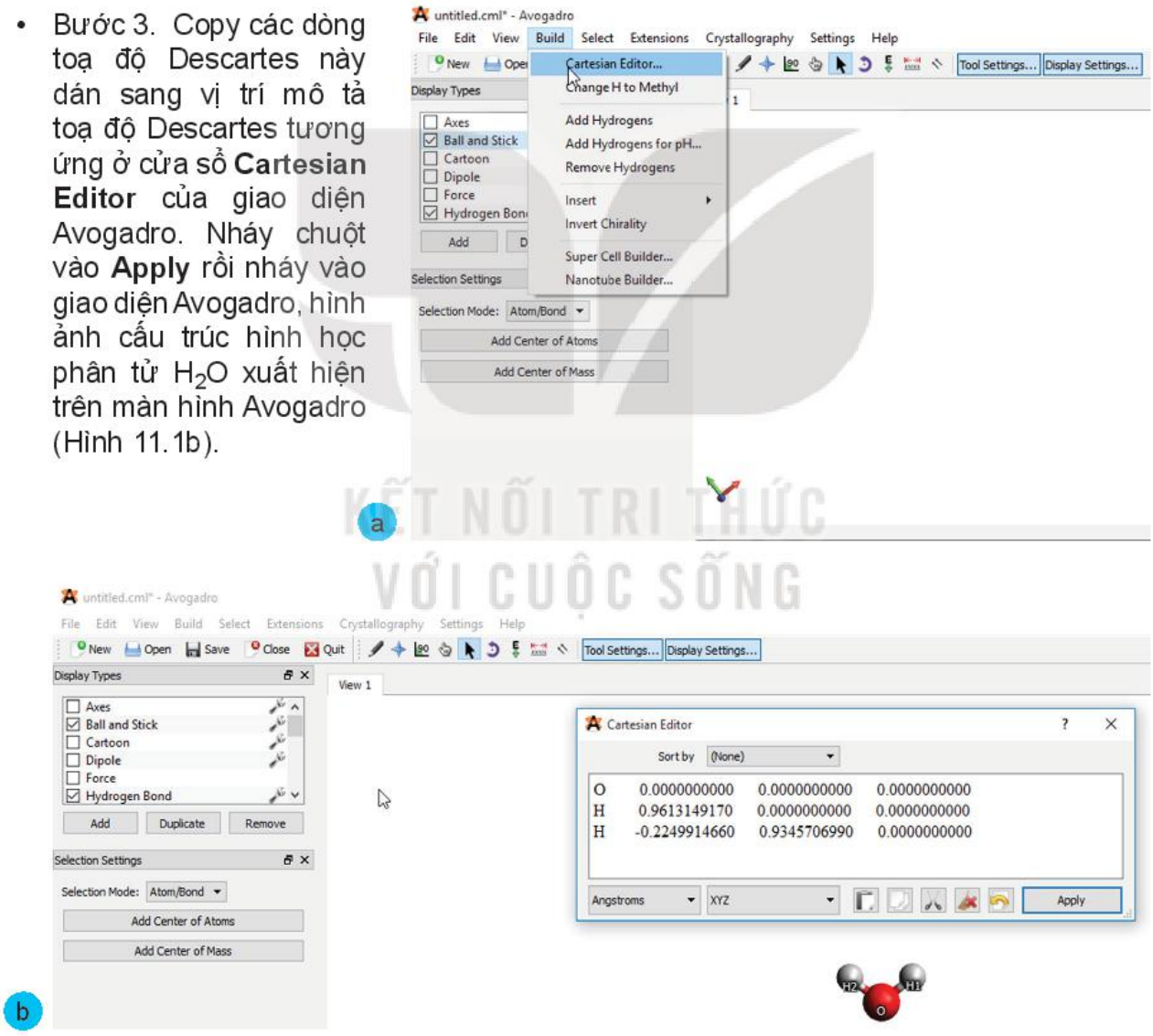
Cách tiến hành:

- Bước 1. Mở phần mềm Avogadro. Chọn lệnh **File** → **New** → **Display Settings** (Cài đặt hiển thị) → **Display Types** (Kiểu hiển thị) → **Ball and Stick** (Quả cầu và que nối). Sau đó chọn lệnh **Build** → **Cartesian Editor** (Hình 11.1a), một cửa sổ xuất hiện cho phép dán toạ độ Descartes của phân tử để hiển thị cấu trúc.
- Bước 2. Mở file kết quả tính "H2O_AM1.out" thu được ở trên, đi đến đoạn văn bản sau:

"CARTESIAN COORDINATES

1	O	0.000000000	0.000000000	0.000000000
2	H	0.961314917	0.000000000	0.000000000
3	H	-0.224991466	0.934570699	0.000000000"

- Bước 3. Copy các dòng toạ độ Descartes này dán sang vị trí mô tả toạ độ Descartes tương ứng ở cửa sổ **Cartesian Editor** của giao diện Avogadro. Nháy chuột vào **Apply** rồi nháy vào giao diện Avogadro, hình ảnh cấu trúc hình học phân tử H_2O xuất hiện trên màn hình Avogadro (Hình 11.1b).



Hình 11.1. *Cách hiển thị cấu trúc của phân tử H_2O trong Avogadro từ kết quả tính tối ưu cấu trúc hình học sử dụng phần mềm MOPAC*
a) Cách hiển thị bảng toạ độ Descartes;
b) Cách dán toạ độ vào bảng toạ độ Descartes để hiển thị cấu trúc.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Các bước hiển thị các tham số cấu trúc:

- *Hiển thị độ dài các liên kết*

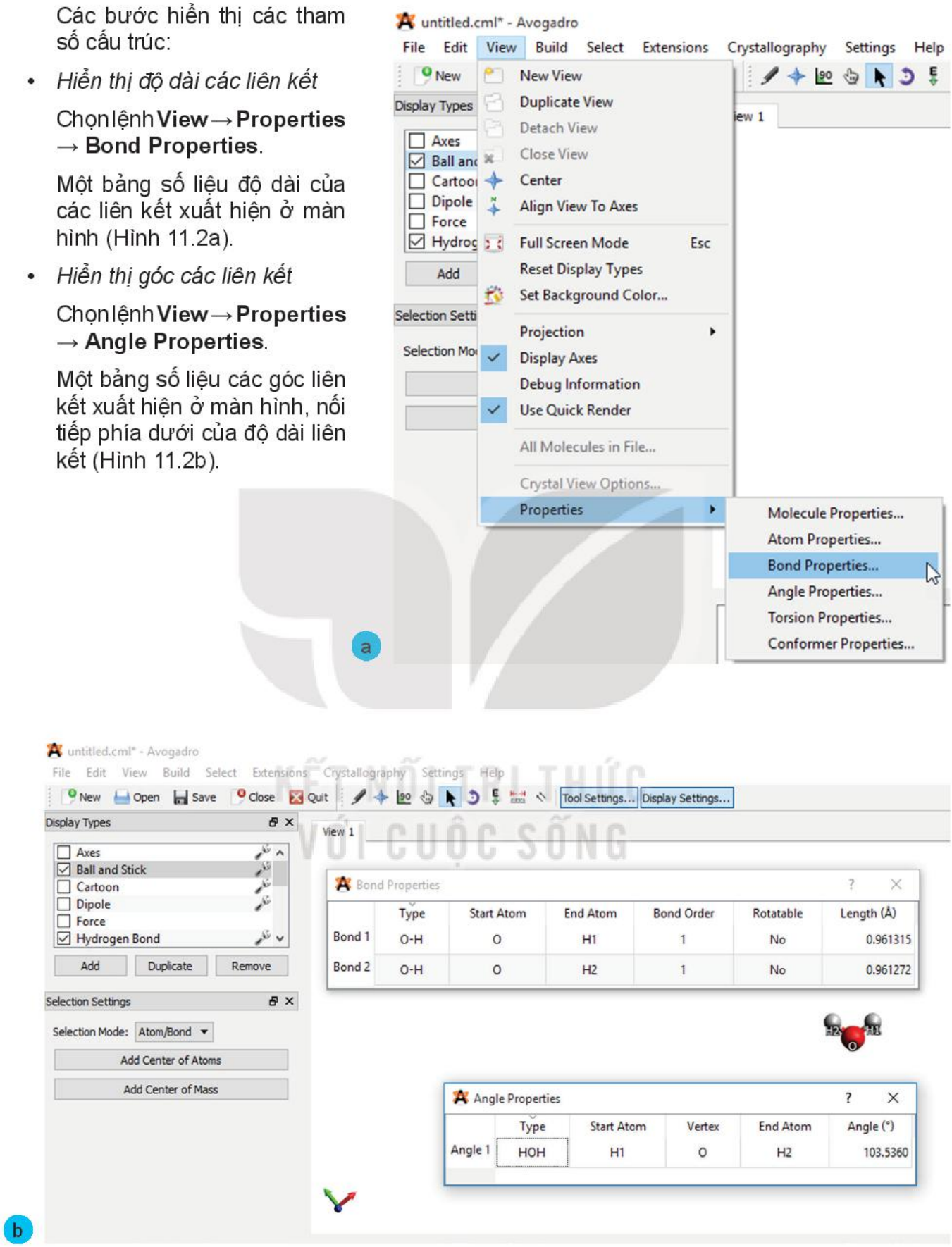
  Chọn lệnh **View → Properties → Bond Properties**.

  Một bảng số liệu độ dài của các liên kết xuất hiện ở màn hình (Hình 11.2a).

- *Hiển thị góc các liên kết*

  Chọn lệnh **View → Properties → Angle Properties**.

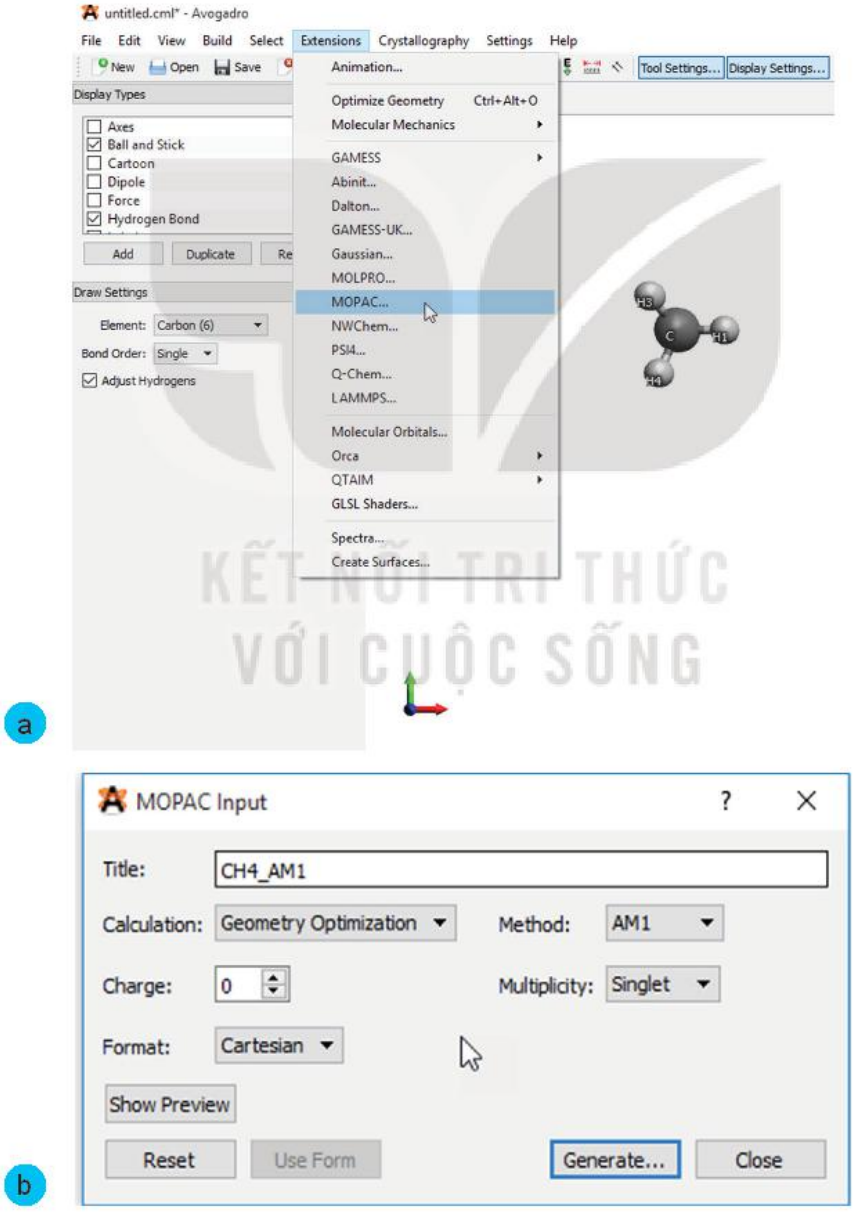
  Một bảng số liệu các góc liên kết xuất hiện ở màn hình, nối tiếp phía dưới của độ dài liên kết (Hình 11.2b).



Hình 11.2. *Hiển thị độ dài liên kết (a) và góc liên kết (b) của phân tử H_2O*

Chú ý: Ngoài việc hiển thị được cấu trúc phân tử từ toạ độ Descartes và hiển thị được các tham số cấu trúc, phần mềm Avogadro còn cho phép tạo các file đầu vào cho các phép tính bán kinh nghiệm như AM1. Ví dụ: Tạo file đầu vào cho phép tính bán kinh nghiệm AM1 cho phân tử CH_4:

- Bước 1: Vẽ cấu trúc phân tử CH_4. Ở phía trái giao diện phần mềm Avogadro, chọn **Draw Settings** → **Element**, chọn nguyên tố carbon. Nháy chuột vào màn hình Avogadro, cấu trúc phân tử CH_4 được hiển thị.
- Bước 2: Chọn **Extensions** → **MOPAC** (Hình 11.3a), cửa sổ MOPAC input xuất hiện (Hình 11.3b) → Khai báo tên (**Title**), nội dung của phép tính (**Calculation**) và phương pháp tính (**Method**) (Hình 11.3b) → Nháy chuột vào **Generate**. Phần mềm sẽ tạo một file đầu vào cho phép tính AM1 có đuôi ".mop", ví dụ CH4_AM1.mop. Lưu file này vào thư mục D: \Nguyen_Van_A\MOPAC_working\ và thực hiện phép tính như được mô tả ở mục II.2.



Hình 11.3. *Các bước tạo file đầu vào cho phép tính bán kinh nghiệm AM1 dùng phần mềm Avogadro.*
a) Đi đến Extension → MOPAC; b) Các khai báo để tạo file đầu vào cho phép tính.

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

2. Tạo file dữ liệu và thực hiện phép tính tối ưu hoá cấu trúc của phân tử, tính nhiệt hình thành và năng lượng phân tử của NH_3, CH_4.

Hướng dẫn:

File dữ liệu để tối ưu hoá cấu trúc, tính nhiệt hình thành và năng lượng phân tử của NH_3 bằng phần mềm MOPAC có nội dung như sau:

```
AM1 OPT
NH3
Geometry Optimization
H   0.0 0      0.0 0      0.0 0
N 1.01 1       0.0 0      0.0 0       1 0 0
H 1.01 1     107.0 1      0.0 0       2 1 0
H 1.01 1     107.0 1    120.0 1       2 3 1
```

Trong đó 120.0 là giá trị góc nhị diện của hai mặt phẳng: H(4)N(2)H(3) và N(2)H(3)H(1).

Cách tiến hành: thực hiện theo các bước như ở Hoạt động 1, Hoạt động 2 và Hoạt động 3, ở các mục II, III.

3. Sử dụng kết quả tính tối ưu hoá cấu trúc để thấy được cấu trúc hình học, hiển thị được các tham số cấu trúc của phân tử NH_3, CH_4. Từ đó thấy được xu hướng biến đổi độ dài liên kết H–X và góc liên kết HXH (X là O, N, C).

Hướng dẫn: Thực hiện theo các bước như ở Hoạt động 4, Hoạt động 5, mục III.

EM ĐÃ HỌC

Tối ưu cấu trúc hình học, tính nhiệt tạo thành và năng lượng phân tử của một chất bằng cách sử dụng phương pháp bán kinh nghiệm. Sử dụng được kết quả tính toán để hiển thị được hình học phân tử và các tham số cấu trúc như độ dài, góc liên kết.

EM CÓ THỂ

Sử dụng kết quả tính toán để thấy được xu hướng thay đổi độ dài liên kết, góc liên kết, năng lượng phân tử trong dãy chất, ví dụ CH_4, NH_3, H_2O phù hợp với định luật tuần hoàn.

GIẢI THÍCH MỘT SỐ THUẬT NGỮ DÙNG TRONG SÁCH

	THUẬT NGỮ	Trang
Đ	*Điểm chớp cháy:* nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà hơi chất cháy bốc cháy khi gặp nguồn lửa nhưng sau đó tắt ngay.	34
E	*Entropy:* thước đo mức độ hỗn loạn (mất trật tự) của hệ chứa số lượng lớn hạt như nguyên tử, phân tử hoặc ion.	24
L	*Lai hoá orbital:* các orbital có năng lượng gần nhau có thể "tổ hợp" với nhau tạo thành các orbital mới – orbital lai hoá.	9
N	*Năng lượng hoạt hoá:* năng lượng tối thiểu mà các chất phản ứng cần có để phản ứng hoá học có thể xảy ra.	19
	Năng lượng tự do Gibbs: Biến thiên năng lượng tự do Gibbs của phản ứng cho phép dự đoán chiều hướng tự diễn biến của phản ứng.	26
	Nhiệt độ ngọn lửa: nhiệt độ cao nhất tạo ra bởi phản ứng đốt cháy chất cháy ở áp suất khí quyển.	35
	Nhiệt độ tự bốc cháy: nhiệt độ thấp nhất ở áp suất khí quyển mà chất cháy tự bốc cháy mà không cần tiếp xúc với nguồn lửa.	37
P	*Phóng xạ:* quá trình phân rã hạt nhân đồng thời phát ra các hạt α, β, γ.	14
T	*Trạng thái cân bằng:* trạng thái của phản ứng mà tại đó cứ bao nhiêu phân tử chất phản ứng mất đi thì có bấy nhiêu phân tử chất phản ứng được tạo thành.	26

Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam xin trân trọng cảm ơn các tác giả có tác phẩm, tư liệu được sử dụng, trích dẫn trong cuốn sách này.

Chịu trách nhiệm xuất bản:
Chủ tịch Hội đồng Thành viên NGUYỄN ĐỨC THÁI
Tổng Giám đốc HOÀNG LÊ BÁCH

Chịu trách nhiệm nội dung:
Tổng biên tập PHẠM VĨNH THÁI

Biên tập nội dung: NGUYỄN THANH GIANG – VĂN THỊ MINH HUỆ – PHÙNG THỊ PHƯƠNG LIÊN
Biên tập mĩ thuật: NGUYỄN BÍCH LA
Thiết kế sách: PHẠM THỊ MINH THU
Trình bày bìa: NGUYỄN BÍCH LA
Minh hoạ: NGUYỄN BÍCH LA
Sửa bản in: PHẠM THỊ TÌNH
Chế bản: CTCP MĨ THUẬT VÀ TRUYỀN THÔNG

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Bản quyền thuộc Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam.

Tất cả các phần của nội dung cuốn sách này đều không được sao chép, lưu trữ, chuyển thể dưới bất kì hình thức nào khi chưa có sự cho phép bằng văn bản của Nhà xuất bản Giáo dục Việt Nam.

CHUYÊN ĐỀ HỌC TẬP HOÁ HỌC 10
Mã số: G1HHXH002H22
In … bản, (QĐ …) khổ 19 x 26,5 cm.
Đơn vị in: …
Cơ sở in: …
Số ĐKXB: 183-2022/CXBIPH/12-62/GD.
Số QĐXB: …/QĐ - GD - HN ngày … tháng … năm 20…
In xong và nộp lưu chiểu tháng ... năm 20...
Mã số ISBN: 978-604-0-31088-0

HUÂN CHƯƠNG HỒ CHÍ MINH

BỘ SÁCH GIÁO KHOA LỚP 10 – KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

1. Ngữ văn 10, tập một
2. Ngữ văn 10, tập hai
3. Chuyên đề học tập Ngữ văn 10
4. Toán 10, tập một
5. Toán 10, tập hai
6. Chuyên đề học tập Toán 10
7. Lịch sử 10
8. Chuyên đề học tập Lịch sử 10
9. Địa lí 10
10. Chuyên đề học tập Địa lí 10
11. Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10
12. Chuyên đề học tập Giáo dục Kinh tế và Pháp luật 10
13. Vật lí 10
14. Chuyên đề học tập Vật lí 10
15. Hoá học 10
16. Chuyên đề học tập Hoá học 10
17. Sinh học 10
18. Chuyên đề học tập Sinh học 10
19. Công nghệ 10 – Thiết kế và Công nghệ
20. Chuyên đề học tập Công nghệ 10 – Thiết kế và Công nghệ
21. Công nghệ 10 – Công nghệ trồng trọt
22. Chuyên đề học tập Công nghệ 10 – Công nghệ trồng trọt
23. Tin học 10
24. Chuyên đề học tập Tin học 10 – Định hướng Tin học ứng dụng
25. Chuyên đề học tập Tin học 10 – Định hướng Khoa học máy tính
26. Mĩ thuật 10 – Thiết kế mĩ thuật đa phương tiện
27. Mĩ thuật 10 – Thiết kế đồ hoạ
28. Mĩ thuật 10 – Thiết kế thời trang
29. Mĩ thuật 10 – Thiết kế mĩ thuật sân khấu, điện ảnh
30. Mĩ thuật 10 – Lí luận và lịch sử mĩ thuật
31. Mĩ thuật 10 – Điêu khắc
32. Mĩ thuật 10 – Kiến trúc
33. Mĩ thuật 10 – Hội hoạ
34. Mĩ thuật 10 – Đồ hoạ (tranh in)
35. Mĩ thuật 10 – Thiết kế công nghiệp
36. Chuyên đề học tập Mĩ thuật 10
37. Âm nhạc 10
38. Chuyên đề học tập Âm nhạc 10
39. Hoạt động trải nghiệm, hướng nghiệp 10
40. Giáo dục thể chất 10 – Bóng chuyền
41. Giáo dục thể chất 10 – Bóng đá
42. Giáo dục thể chất 10 – Cầu lông
43. Giáo dục thể chất 10 – Bóng rổ
44. Giáo dục quốc phòng và an ninh 10
45. Tiếng Anh 10 – Global Success – Sách học sinh

KẾT NỐI TRI THỨC VỚI CUỘC SỐNG

Các đơn vị đầu mối phát hành

- **Miền Bắc:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Hà Nội
  CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Bắc
- **Miền Trung:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Đà Nẵng
  CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Trung
- **Miền Nam:** CTCP Đầu tư và Phát triển Giáo dục Phương Nam
  CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục miền Nam
- **Cửu Long:** CTCP Sách và Thiết bị Giáo dục Cửu Long

Sách điện tử: http://hanhtrangso.nxbgd.vn

Kích hoạt để mở học liệu điện tử: Cào lớp nhũ trên tem để nhận mã số. Truy cập http://hanhtrangso.nxbgd.vn và nhập mã số tại biểu tượng chìa khoá.

ISBN 978-604-0-31088-0

9 786040 310880

Bản in thử
SÁCH KHÔNG BÁN